

НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ
«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ
ІМЕНІ ІГОРЯ СІКОРСЬКОГО»

На правах рукопису

Куліков Костянтин Вячеславович

УДК 621.382

МЕТОД МОДЕЛЮВАННЯ ІМПУЛЬСНИХ ТА ЧАСТОТНИХ
ХАРАКТЕРИСТИК ІІІ-НІТРИДІВ

05.27.01 Твердотільна електроніка

ДИСЕРТАЦІЯ
на здобуття наукового ступеня кандидата технічних наук

Науковий керівник:
Москалюк Володимир Олександрович
к. т. н., проф.

Київ 2021

ЗМІСТ

АНОТАЦІЯ.....	4
ВСТУП	12
1. ОГЛЯД ХАРАКТЕРИСТИК ІІІ-НІТРИДІВ	21
1.1 ОСОБЛИВОСТІ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ МАТЕРІАЛІВ $A^{III}B^V$ З АЗОТОМ	21
1.1.1 ЗОННА СТРУКТУРА	22
1.1.1.1 Нітрид індію (<i>InN</i>).....	26
1.1.1.2 Нітрид галію (<i>GaN</i>).....	28
1.1.1.3 Нітрид алюмінію (<i>AlN</i>)	30
1.1.2 СПЕКТР ФОНОНІВ.....	32
1.1.3 ПАРАМЕТРИ МАТЕРІАЛІВ, ЩО ВИКОРИСТАНО ПРИ МОДЕЛЮВАННІ.	33
1.2 ОГЛЯД ТА ПОРІВНЯННЯ ЗАСОБІВ МОДЕЛЮВАННЯ	35
1.3 ІСНУЮЧІ МЕТОДИ ОЦІНЮВАННЯ ГРАНИЧНИХ ЧАСТОТ ІІІ-НІТРИДІВ	39
1.3.1 ІДЕАЛІЗОВАНИЙ РЕЖИМ ОБМЕЖЕННЯ НАКОПИЧЕННЯ ОБ'ЄМНОГО ЗАРЯДУ (ОНОЗ) ТА ЧАСТОТА ПЕРШОЇ ГАРМОНІКИ.....	40
1.3.2 МЕТОД ГРАНИЧНОЇ ЧАСТОТИ ІСНУВАННЯ ВДП.	43
1.4 ВИСНОВКИ ДО РОЗДІЛУ 1	44
2. ЗАСОБИ МОДЕЛЮВАННЯ.....	45
2.1. ЗАГАЛЬНИЙ ОПИС МЕТОДУ	45
2.1.1 МЕТОД КІНЕТИЧНОГО РІВНЯННЯ.....	45
2.1.2 НАБЛИЖЕННЯ ЧАСУ РЕЛАКСАЦІЇ	48
2.1.3 ОСОБЛИВОСТІ РОЗСПІВАННЯ НОСІЇВ.....	50
2.1.4 ОСОБЛИВОСТІ ДЛЯ БАГАТОДОЛИННИХ НАПІВПРОВІДНИКІВ.....	53
2.1.5 ПРУЖНІСТЬ РОЗСПІВАННЯ	59
2.1.6 ЕЛЕКТРОННА ТЕМПЕРАТУРА.....	61
2.2 ВЕРИФІКАЦІЯ МОДЕЛІ	63
2.3 РЕЗУЛЬТАТИ ТА ВИСНОВКИ ДО РОЗДІЛУ 2.....	68
3. АНАЛІЗ ІМПУЛЬСНИХ ТА ВИСОКОЧАСТОТНИХ ХАРАКТЕРИСТИК ІІІ-НІТРИДІВ	69

3.1	ІМПУЛЬСНІ ВЛАСТИВОСТІ.	69
3.2	ВИСОКОЧАСТОТНА ПРОВІДНІСТЬ.....	73
3.3.	ОЦІНЮВАННЯ ГРАНИЧНИХ ЧАСТОТ ІІІ-НІТРИДІВ	77
3.3.1	ГРАНИЧНА ЧАСТОТА ІСНУВАННЯ ВДП	77
3.3.2	СПЕКТРАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА ВІДГУКУ ДРЕЙФОВОЇ ПРОВІДНОСТІ	81
3.4	ОБРАННЯ ПАРАМЕТРІВ МОДЕЛЮВАННЯ	82
3.5	РЕЗУЛЬТАТИ ТА ВИСНОВКИ ДО РОЗДІЛУ 3.....	84
4	РЕЗУЛЬТАТИ МОДЕЛЮВАННЯ	85
4.1	МОДЕЛЮВАННЯ ІМПУЛЬСНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ	85
4.2	ОСОБЛИВОСТІ «СПЛЕСКУ» ДРЕЙФОВОЇ ШВИДКОСТІ ІІІ-НІТРИДІВ.....	92
4.3	ПРОСТОРОВИЙ БАЛІСТИЧНИЙ ПРОЛІТ	97
4.4	МОДЕЛЮВАННЯ ВИСОКОЧАСТОТНОЇ ПРОВІДНОСТІ ІІІ-НІТРИДІВ	99
4.5	ЗНАХОДЖЕННЯ ГРАНИЧНИХ ЧАСТОТ	106
4.5.1	ВИКОРИСТАНІ ПРИПУЩЕННЯ.....	106
4.5.2	АНАЛІЗ СПЕКТРАЛЬНОЇ ХАРАКТЕРИСТИКИ.	107
4.5.3	РЕЗУЛЬТАТИ МОДЕЛЮВАННЯ.	108
4.6	ВИСНОВКИ ЗА РЕЗУЛЬТАТАМИ МОДЕЛЮВАННЯ.	116
	ВИСНОВКИ ПО РОБОТІ	120
	ДОДАТОК. ЛІСТІНГИ МАТНСАД.....	122
Д.1	ПАРАМЕТРИ ІІІN. КУБІЧНА КРИСТАЛІЧНА РЕШІТКА.....	122
Д.2	ПАРАМЕТРИ ІІІN. ГЕКСАГОНАЛЬНА КРИСТАЛІЧНА РЕШІТКА.	123
Д.3	ПАРАМЕТРИ GAN. КУБІЧНА КРИСТАЛІЧНА РЕШІТКА.	124
Д.4	ПАРАМЕТРИ GAN. ГЕКСАГОНАЛЬНА КРИСТАЛІЧНА РЕШІТКА.	125
Д.5	ПАРАМЕТРИ ALN. КУБІЧНА КРИСТАЛІЧНА РЕШІТКА.	126
Д.6	ПАРАМЕТРИ ALN. ГЕКСАГОНАЛЬНА КРИСТАЛІЧНА РЕШІТКА.....	127
Д.7	УНІФІКОВАНИЙ МОДУЛЬ МОДЕЛЬНИХ РОЗРАХУНКІВ ІІІ-НІТРИДІВ	128
	ДОДАТОК. АКТ ВПРОВАДЖЕННЯ.....	122
	СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ	135

Анотація

У рукопису запропоновано метод моделювання і аналізу імпульсних та високочастотних властивостей багатодолинних напівпровідників. Модель застосовано до без перебільшення сучасних, актуальних і, як буде доведено у тому числі у рукописі, перспективних напівпровідникових матеріалів GaN, AlN і InN, які зараз все більше стають відомі під узагальнюючою назвою III-нітриди. Метод відрізняється можливістю застосування одночасно як для динамічних задач у часі, так і змінних у просторі полів та збалансованим використанням обчислювальних ресурсів без істотних втрат точності.

Базисом запропонованого підходу є чисельне рішення системи диференціальних рівнянь, які отримані з кінетичного рівняння Больцмана у наближенні часу релаксації по функції розподілу у k -просторі. Ці рівняння відомі під узагальненою назвою релаксаційних. В англійській літературі цей метод зустрічається під назвою «*Method of moments*» (метод моментів). Але на відміну від традиційного використання рівнянь для концентрації носіїв, їх імпульсу і енергії у праці використано замість рівняння релаксації енергії рівняння для електронної температури у якості міри середньої енергії тільки хаотичного руху. Друга принципова відмінність полягає в тому, що часи релаксації визначаються через усереднення квантовомеханічних швидкостей розсіювання, зазвичай використовуваних у методі Монте-Карло, для окремих видів розсіювання, а не як інтегральні значення із статичних характеристик матеріалу. Різні механізми розсіювання носіїв враховуються через специфічні для них часи релаксації за допомоги проведення усереднення за максвеллівською функцією розподілу в наближенні електронної температури. Система отриманих рівнянь включає рівняння у частинних похідних як за часом так і за координатами, що дає можливість дослідити характерні прояви імпульсних властивостей напівпровідникових матеріалів, зокрема: «балістичний транспорт» носіїв у просторі та ефект «сплеску» дрейфової швидкості у часі.

Вперше розглянуто використання Фур'є-перетворення імпульсної залежності дрейфової швидкості носіїв для обчислення максимальних частот, на яких у напівпровіднику можлива провідність. Форма спектральної характеристики швидкості дрейфу носіїв демонструє зв'язок з механізмами розсіювання, які переважають в даному електричному полі. Властивості III-нітридів в сильному електричному полі проаналізовано у частотній області і робиться порівняння з опублікованими методами оцінки максимальних частот провідності напівпровідникових матеріалів. Показано, що граничні частоти збільшуються із зростанням напруженості електричного поля і складають для III-нітридів сотні гігагерців, а для нітриду алюмінію зокрема перевищують тисячу гігагерців. Це пов'язано, за висновками роботи, з найбільшими для нього міждолинними відстанями і відповідно з порівняно ослабленим міждолинним розсіюванням.

Проведений аналіз просторового прояву ефекту «сплеску» демонструє можливість балістичного прольоту носіїв (практично без зіткнень) у сильному полі на відстані до сотих і десятих часток мікрометра.

Ключові слова — нітрид галію; нітрид алюмінію; нітрид індію; III-нітриди; механізми розсіювання; міждолинне розсіювання; часи релаксації; сильне електричне поле; балістичний транспорт; динамічні характеристики; гранична частота

Окремі результати рукопису були оприлюднені раніше у численних наукових публікаціях у реферованих журналах та обговорені з іншими спеціалістами під час фахових технічних конференцій:

- 1) Куликов К. В., Москалюк В. А., Ханжиев Д. С. Насыщение дрейфовой скорости и упругость рассеяния. К.: Н.-техн. сб. «Электроника и связь», 2001. т. 11. с.100–104.

- Особистий внесок автора – моделювання та розрахунки.

- 2) Куликов К. В., Москалюк В. А. Высокочастотная проводимость GaAs. К.: Н.-техн. сб. «Электроника и связь», 2002. т. 17, с.40-43
- Особистий внесок автора – моделювання та розрахунки, аналіз особливостей моделі для арсеніду галію.
- 3) Куликов К. В., Москалюк В. А. Импульсная проводимость GaAs в сильном электрическом поле. К.: Вісник Державного університету інформаційно-комунікаційних технологій, 2005. т. 3, № 3-4, с.169-172.
- Особистий внесок автора – моделювання та розрахунки.
- 4) Куликов К. В. Переходные процессы в GaAs в сильном электрическом поле. К.: Н.-техн. сб. «Электроника и связь», тематический выпуск «Проблемы электроники», 2006. с.31-34.
- 5) Куликов К. В., Москалюк В. А. Частотные свойства GaN в сильном электрическом поле. К.: Н.-техн. сб. «Электроника и связь», тематический выпуск «Проблемы электроники», 2007. с.38-40.
- Особистий внесок автора – моделювання та розрахунки, особливості загальної моделі для нітриду галію.
- 6) Куликов К. В., Москалюк В. А. Механизмы рассеяния и параметры нитрида галлия. К.: Н.-техн. сб. «Электроника и связь», тематический выпуск «Проблемы электроники», 2008. т. 1-2, № 1, с.10-13.
- Особистий внесок автора – моделювання та розрахунки, особливості розсіювання для нітриду галію.
- 7) Куликов К. В., Москалюк В. А. Высокочастотные параметры нитрида галлия. К.: Техника и приборы СВЧ, 2008. т. 2. с.48-52.
- Особистий внесок автора – моделювання та розрахунки, особливості розсіювання для нітриду галію.
- 8) Куликов К. В., Москалюк В. А. Частотные параметры нитрида галлия в сильных полях. К: Вісник Державного університету інформаційно-комунікаційних технологій, 2009. т. 7, № 3, с.306-309.

- Особистий внесок автора – моделювання та розрахунки, особливості частотних характеристик нітриду галію.
- 9) Куликов К. В., Москалюк В. А. Всплеск дрейфовой скорости в нитриде галлия. К.: Н.-техн. сб. «Электроника и связь», 2009. т. 4-5, с.28-31.
- Особистий внесок автора – моделювання та розрахунки, опис явища *сплеску швидкості* носіїв у нітриді галію.
- 10) Baida I., Kulikov K., Moskaliuk V., Timofeyev V. Aspects of Intervalley Scattering Simulation Considering Short-wavelength Phonons. 2018 International Conference on Information and Telecommunication Technologies and Radio Electronics (UkrMiCo), Odessa, Ukraine, 2018. pp. 1-4. DOI: 10.1109/ukrmico43733.2018.9047529 (ISBN: 9781538652640)
- Особистий внесок автора – розрахунки та моделювання
- 11) Байда І. П., Куліков К. В., Москалюк В. О., Тимофєєв В. І.. Релаксаційні процеси у субмікронних гетеротранзисторах з системою квантових ям. К.: Мікросистеми, Електроніка та Акустика (ISSN 2523-4455). 2019. т. 24. № 2. с.14-24.
- Особистий внесок автора – розрахунки, використання параметрів III-нітридів для практичних пристроїв
- 12) Куліков К. В., Москалюк В. О., Тимофєєв В. О. Високочастотні властивості GaN, AlN та InN. К.: Мікросистеми, Електроніка та Акустика (ISSN 2523-4455). 2019. т. 24. № 3. с.20-32.
- Особистий внесок автора – розрахунки, моделювання та висновки; підсумкова робота по моделі для III-нітридів
- 13) Kulikov K., Moskaliuk V., Timofeyev V. Electron transport in quantum well heterotransistors., Bulgaria, Svishtov, SworldJournal, 2020, issue №6., part 6, pp. 14–25. DOI: 10.30888/2663-5712.2020-06-06-137
- Особистий внесок автора – розрахунки, використання параметрів III-нітридів для практичних пристроїв

ТЕЗИ доповідей на конференціях:

- 14) Куликов К. В., Москалюк В. А. Аналитический метод расчета времен релаксации в 2D полупроводниковых структурах. Ів.-Франк.: Матеріали ІХ міжнар. конф. «Фізика і технологія тонких плівок». 2003. т. 1, С.93-94.
 - Особистий внесок автора – моделювання та розрахунки.
- 15) Куликов К. В., Москалюк В. А. Времена релаксации и высокочастотная проводимость GaAs. Севастополь: Материалы 13-й межд. конф. «СВЧ-техника и телекомм. технологии» (КрыМиКо'2003). 2003.
 - Особистий внесок автора – моделювання та розрахунки.
- 16) Куликов К. В., Москалюк В. А., Тимофеев В. И. Нитрид галлия: оценка частотных свойств в сильном поле. К.: Тези ІІ Международная научно-техническая конференция «Сучасні інформаційно-комунікаційні технології» COMINFO'2006. 2006.
 - Особистий внесок автора – моделювання та висновки
- 17) Куликов К. В., Москалюк В. А. Пикосекундная релаксация в GaAs. Севастополь: 16-я межд. конф. «СВЧ-техника и телекомм. технологии», Севастополь: Вебер, 2006. с.633-634.
 - Особистий внесок автора – аналіз часу релаксації та розрахунки.
- 18) Куликов К. В., Москалюк В. А. Частотные свойства нитрида галлия в сильном электрическом поле. К.: Тези доп. міжн. н.-техн. конф. «Сучасні інформаційно-комунікаційні технології» COMINFO'2008. 2008. с. 108.
 - Особистий внесок автора – моделювання та висновки
- 19) Bayda I., Kulikov K., Moskaliuk V. Electron heating during intervalley scattering. 2016 IEEE 36th International Conference on Electronics and Nanotechnology (ELNANO). 2016. pp.17-20.
 - Особистий внесок автора – розрахунки та моделювання
- 20) Kulikov K., Moskaliuk V., V. Timofeev. High-frequency conductance cutoff of gallium nitride. 2017 IEEE International conference of information-

telecommunication technologies and radio electronics (UkrMiCo'2017)/
Materials of scientific and technical conference. 2017. pp.317-319.

- Особистий внесок автора – розрахунки та моделювання

21) Kulikov K., Baida I., Moskaliuk V., Timofeyev V. Conductance Cutoff of A3B5 Nitrides at High-Frequency Region. 2018 IEEE 38th International Conference on Electronics and Nanotechnology. 2018. pp.101-105.

- Особистий внесок автора – розрахунки, моделювання та висновки; узагальнення моделі для III-нітридів

22) Kulikov K., Moskaliuk V., Timofeyev V. Modeling Conductance Cutoff of GaN, AlN and InN at High-frequency Region. 2019 IEEE 39th International Conference on Electronics and Nanotechnology (ELNANO). 2019. pp.191-196.

- Особистий внесок автора – розрахунки, моделювання та висновки; уточнення моделі для III-нітридів

Практичним впровадженням можна вважати учать у наступних проектах:

- Отримані у дисертації нові результати впроваджено у навчальний процес для підготовки фахівців за спеціальністю 153 «Мікро- і наносистемна техніка» КПІ ім. Ігоря Сікорського. Акт впровадження від 25 вересня 2019 р. (Наведено у *Додатку. Акт Впровадження*)
- Науково-дослідна робота «Дослідження субмікронних та нанорозмірних структур на основі перспективних напівпровідникових матеріалів», 2008, УДК 621.382, номер держреєстрації 0108U0005938;
- Науково-дослідна робота «Дослідження новітніх нанорозмірних напівпровідникових структур та приладів для розроблення і впровадження технологій їх виготовлення», 2008, УДК 621:382, номер держреєстрації 0107U002392;
- Науково-дослідна робота «Дослідження наногетероструктур на потрійних сполуках $A^{III}B^V$ для моделювання їх електронних властивостей та ефектів», 2017, УДК 621:382, код КВНТД 1.2 12.27.01, номер держреєстрації 0115U000400.

Abstract

The dissertation work proposed a method for modeling and interpreting the high-frequency characteristics of multi-valley semiconductors, in particular, GaN, AlN, and InN. The model is practiced to state-of-the-art, encouraging, and relevant materials GaN, AlN, and InN, which are now recognized under the generic name III-nitrides. The method is noticed by the economical use of computational resources without meaningful loss of accuracy and the feasibility of using both for dynamic tasks over time and variables in the scope of fields.

The introduced approach is based on solving a system of differential equations, which are known as relaxation equations and are obtained from the Boltzmann kinetic equation in the relaxation time approximation by averaging over k -space. In English literature, this method is known as the "method of momentum." Indifference to the traditional system of equations for the concentration of carriers, their momentum, and energy, here, alternately of the energy relaxation equation, the equation for electron temperature is done as a measure of the energy of only chaotic movement. The second meaningful difference is that the relaxation times are not defined as integral values from the static properties of the material, but for averaging the quantum-mechanical scattering rates usually used in the Monte Carlo method for particular types of scattering. The averaging was made over the Maxwell distribution function in the electron temperature approximation, as an outcome of which numerous mechanisms of carrier scattering through their explicit relaxation times are taken into account. Since the system of equations applied includes equations in partial derivatives concerning time and coordinates, it performs it possible to examine the characteristic demonstrations of the impulse properties of the materials under consideration, particularly, the time effect of the "overshoot" of drift velocity and the spatial "ballistic transport" of carriers.

For the first time, the use of the Fourier transform of the impulse dependence of the carrier drifts velocity to calculate the highest frequencies inherent in a semiconductor is recognized. A relationship was found between the contour of the spectral characteristic of the drift velocity and the scattering mechanisms that pre-

dominate in a given electric field. The characteristics of III-nitrides in the frequency region in a strong electric field are investigated and correlated with existing methods for predicting cut-off frequencies. It is determined that the limiting frequencies increase with increasing electric field strength and result in hundreds of gigahertz, and for aluminum nitride, it passes one thousand gigahertz. This is due, obviously, to the greatest for him inter-valley distances and, therefore, with a decreased inter-valley scattering. The study of the spatial manifestation of the splash effect gives the possibility of an approximately collisionless, ballistic flight of electrons in a strong field at ranges up to hundredths and tenths of a micrometer.

Keywords — III-nitrides; gallium nitride; aluminum nitride; indium nitride; scattering mechanisms; inter-valley scattering; relaxation times; strong electric field; overshoot; dynamic performance; cutoff frequency

ВСТУП

Актуальність теми. Вивчення різного типу нерівноважних процесів у напівпровідниках залишається однією з найбільш затребуваних областей вивчення у сучасній електроніці. Це обумовлено необхідністю підвищення ефективності, функціональності та частотного діапазону активних напівпровідникових компонентів.

Пошук йде у напрямках як знаходження нових ефектів та явищ, так і більш повного використання традиційних ефектів і еволюційного вдосконалення існуючих приладів. Це стає можливим завдяки покращенням у технології виготовлення напівпровідникових структур та результатам фундаментальних досліджень властивостей та внутрішньої будови напівпровідникових матеріалів.

Робота сконцентрована навколо побудови чисельної моделі дрейфових процесів у сильному полі для напівпровідникових матеріалів групи $A^{III}B^V$, зокрема III-нітридів, які саме зараз знаходяться у фазі активного впровадження, вдосконалення та використання у найсучаснішій електроніці. З'ясування верхньої граничної частоти провідності для цієї групи напівпровідників дозволить прогнозувати розвиток та перспективність подальших капіталовкладень. Саме чисельна модель дозволяє прогнозувати та перевіряти допущення без дорогих та екологічно небезпечних натурних експериментів.

Із зроблених теоретичних модельних оцінок та отриманих результатів можна стверджувати, що прилади на III-нітридах можуть працювати на частотах біля 1ТГц, що підтверджує перспективність та актуальність подальшого вивчення та розробки реальних приладів.

Додатково треба зауважити аналітичність та відносну обчислювальну простоту методу, що дозволяє адаптувати результати для використання з іншими напівпровідниковими матеріалами та ефектами і отримувати результати швидко та дешево.

Зв'язок роботи з науковими планами, темами та програмами. Дисертаційна робота виконана на кафедрі електронної інженерії Національного Технічного Університету України «Київський Політехнічний Інститут імені Ігоря Сікорського». Вона є частиною наступних проектів:

- Науково-дослідна робота «ДОСЛІДЖЕННЯ СУБМІКРОННИХ ТА НАНОРОЗМІРНИХ СТРУКТУР НА ОСНОВІ ПЕРСПЕКТИВНИХ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ МАТЕРІАЛІВ», 2008, УДК 621.382, номер держреєстрації 0108U0005938;
- Науково-дослідна робота «ДОСЛІДЖЕННЯ НОВІТНІХ НАНОРОЗМІРНИХ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ СТРУКТУР ТА ПРИЛАДІВ ДЛЯ РОЗРОБЛЕННЯ І ВПРОВАДЖЕННЯ ТЕХНОЛОГІЙ ЇХ ВИГОТОВЛЕННЯ», 2008, УДК 621:382, номер держреєстрації 0107U002392;
- Науково-дослідна робота «ДОСЛІДЖЕННЯ НАНОГЕТЕРОСТРУКТУР НА ПОТРІЙНИХ СПОЛУКАХ $A^{III}B^V$ ДЛЯ МОДЕЛЮВАННЯ ЇХ ЕЛЕКТРОННИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ ТА ЕФЕКТІВ», 2017, УДК 621:382, код КВНТД 1.2 12.27.01, номер держреєстрації 0115U000400.

Мета та завдання дослідження. Досягнутою головною метою роботи є розроблення *методу моделювання динамічних характеристик* багатодолинних напівпровідникових матеріалів групи $A^{III}B^V$, зокрема III-нітридів, для *прогнозування верхніх граничних частот досліджуваних матеріалів*.

Для досягнення цієї цілі було вирішено наступні завдання:

1. Розробити метод моделювання динамічних характеристик багатодолинних напівпровідникових матеріалів групи $A^{III}B^V$, який базується на кінетичному рівнянні з модельними спрощеннями;
2. Вдосконалити модель перенесення носіїв у багатодолинних напівпровідниках з урахуванням часів релаксації імпульсу та енергії для різних видів (у тому числі міждолинного) розсіювання;

3. Дослідити реакцію носіїв на високочастотні електричні поля і визначити максимальні частоти існування від'ємної диференційної провідності (ВДП) для досліджуваних напівпровідникових матеріалів;
4. Дослідити реакцію носіїв на імпульсні електричні поля у матеріалах групи $A^{III}B^V$ для: а) аналізу ефекта сплеску у часі (*overshoot*) дрейфової швидкості носіїв, б) можливостей досліджуваних матеріалів щодо довжини балістичного прольоту носіїв, в) оцінки максимальних частот в залежності від напруженості електричного поля.

Об'єкт та предмет дослідження. Об'єктом дослідження є електричні властивості та модель електронного транспорту в багатодолинних напівпровідниках групи $A^{III}B^V$ на прикладі III-нітридів у сильних електричних полях. Предмет - імпульсні та динамічні характеристики багатодолинних напівпровідникових сполук групи $A^{III}B^V$.

Методи дослідження. У роботі використано метод релаксаційних рівнянь у частинних похідних у наближення часів релаксації імпульсу та енергії; методи чисельного розв'язку систем диференціальних рівнянь Рунге-Кути 4-го порядку; дослідження спектру провідності за допомогою перетворення Фур'є; для чисельного моделювання використовувались сучасні комп'ютерні математичні програми.

Наукова новизна отриманих результатів.

1. Вперше запропоновано метод моделювання динамічних характеристик багатодолинних напівпровідникових матеріалів групи AІІІBV, який базується на релаксаційних рівняннях у наближенні часів релаксації, і дозволяє отримувати оцінку частотних властивостей ІІІ-нітридів з урахуванням впливу сильного електричного поля;
2. Вдосконалено математичну модель електронного транспорту у формі системи диференціальних рівнянь у частинних похідних, для якої вперше отримано аналітичні вирази для часів релаксації імпульсу та енергії для різних видів розсіювання, зокрема міждолинного;
3. Встановлено закономірності та особливості процесів розігрівання електронного газу у багатодолинних напівпровідниках групи AІІІBV у сильних електричних полях, пов'язані з особливостями зонної структури та міждолинними переходами;
4. На основі методу та математичної моделі встановлено особливості: руху носіїв ІІІ-нітридів у сильних змінних у часі та просторі електричних полях; розподілу концентрації носіїв у долинах у залежності від електричного поля, закономірності імпульсної провідності. Це дало змогу здійснити порівняльний аналіз різних методів оцінки граничних частот провідності багатодолинних напівпровідників і запропонувати новий, який ґрунтується на спектральному аналізі відгуку носіїв на імпульсне електричне поле.

Практичне значення отриманих результатів.

1. Розроблена модель у вигляді релаксаційних рівнянь придатна для аналізу електронного транспорту у сильному електричному полі і дозволяє моделювати динамічні ефекти, специфічні для субмікронних розмірів приладів.
2. Розроблено новий підхід до оцінки верхніх граничних частот напівпровідників, зокрема III-нітридів, що відрізняється від поширених раніше. Критерії визначення верхніх граничних частот здійснено на основі порівняння існуючих методів та запропонованого нового і мають практичне значення.
3. Отримані аналітичні вирази для розрахунку часів релаксації, зокрема міждолинної, дозволяють аналізувати внесок окремих видів розсіювання на енергетичні і швидкісні характеристики матеріалів.
4. Вперше здійснено розрахунок верхніх граничних частот III-нітридів не тільки за критеріями існування від'ємної диференціальної провідності чи режиму генерування у діоді Гана, але і через спектральне перетворення відгуку дрейфової швидкості на імпульс електричного поля.
5. Отримано характеристики тестових твердотільних структур та зроблено порівняння модельних та експериментальних даних.

Отримані моделі та співвідношення дозволяють вивчати більш широкий спектр наукових питань, а також оптимально обрати напівпровідниковий матеріал під технічне завдання на розробку пристрою. Звузивши кількість натурних експериментів завдяки заздалегідь розрахованому оптимальному напівпровідниковому матеріалу за моделлю вирішуються практичні питання здешевлення розробки нових пристроїв та прискорення їх виходу на ринок.

Метод дозволяє цілеспрямовано проводити відбір режимів, які практично необхідні для функціонування пристрою та не обмежується тільки частотними характеристиками чи тільки III-нітридами.

Особистий внесок здобувача.

Здобувач безпосередньо приймав участь у побудові моделі дрейфового руху носіїв у багатодолинних напівпровідниках у релаксаційному наближенні, моделюванні та дослідженні ефект сплеску (*overshoot*) дрейфової швидкості носіїв і, відповідно, спектральних особливостей її відгуку на імпульсну дію електричного поля. Вперше опублікував результати модельних розрахунків максимальних частот існування від'ємної диференційної провідності (ВДП) для досліджуваних матеріалів та запропонував альтернативний метод оцінки верхніх граничних частот за спектральною характеристикою відгуку дрейфової провідності напівпровідника на електричне поле за реакцією на короткий імпульс.

Апробація результатів дисертації.

Основні результати дисертації були повідомлені 11 разів на 10 міжнародних конференціях:

- міжнародній науково-технічній конференції «Проблемы физической и биомедицинской электроники», Київ, 12-14 червня 2001
 - Доповідь «Насыщение дрейфовой скорости и упругость рассеяния»;
- міжнародній науково-технічній конференції «Проблемы Электроники» Київ, 17-19 червня 2003
 - Доповідь «Импульсная проводимость GaAs»;
- XXV міжнародній науково-технічній конференції «Проблемы Электроники», Київ, 19-21 квітня 2005
 - Доповідь «Динамическая проводимость GaAs»;
- XXVI міжнародній науково-технічній конференції «Проблемы Электроники», Київ, 11-13 квітня 2006
 - Доповідь «Переходные процессы в GaAs в сильном электрическом поле»;

- Доповідь «Всплеск» скорости дрейфа в GaAs»;
- II міжнародній науково-технічній конференції «Сучасні інформаційно-комунікаційні технології» COMINFO'2006, Київ-Кацивелі, 8-14 жовтня 2006
- Доповідь «Нитрид галлия: оценка частотных свойств в сильном поле»
- XXVII міжнародній науково-технічній конференції «Проблемы Электроники», Київ, 17-19 квітня 2007
- Доповідь «Частотные свойства GaN в сильном поле»;
- XXIX міжнародній науково-технічній конференції «Проблемы Электроники», Київ, 15 квітня 2009
- Доповідь «Всплеск» дрейфовой скорости носителей в нитриде галлия»;
- 2016 IEEE 36th International Conference on ELECTRONICS and NANOTECHNOLOGY (ELNANO-2016), Kyiv, Ukraine, 19 – 21 April 2016
- Доповідь «Electron Heating during Intervalley Scattering»;
- The Second IEEE International Conference on Information and Telecommunication Technologies and Radio Electronics (UkrMiCo'2017), Odesa, Ukraine, 11-15 September 2017
- Доповідь «High-frequency conductance cutoff of gallium nitride»;
- 2018 IEEE 38th International Conference on ELECTRONICS and NANOTECHNOLOGY (ELNANO-2018), Kyiv, Ukraine, 24 – 26 April 2018
- Доповідь «Conductance Cutoff of AlIBV Nitrides at High-frequency Region»;
- 2019 IEEE 39th International Conference on ELECTRONICS and NANOTECHNOLOGY (ELNANO-2019), Kyiv, Ukraine, 16 – 18 April 2018

- Доповідь «Modeling Conductance Cutoff of GaN, AlN and InN at High-frequency Region».

Публікації. За матеріалами дисертації опубліковано 13 статей [1 – 13] у реферованих наукових журналах та 9 робіт у збірниках тез конференцій [14 – 22].

Структура дисертації. Дисертацій складається зі вступу, 3 розділів та загальних висновків. Робота викладена на 142 сторінках і містить 45 малюнків, 2 таблиці і список використаних джерел з 78 найменувань.

Короткий зміст розділів.

У *першому розділі* проведено розгляд особливостей напівпровідникових матеріалів $A^{III}B^V$ з азотом. Зокрема обрано параметри матеріалів з різних джерел для подальшого використання під час моделювання.

Крім того наведено огляд існуючих методів оцінювання граничних частот III-нітридів та обмеження і переваги їх використання. Розглянуто метод знаходження *частоти першої гармоніки* у ідеалізованому режимі обмеження накопичення об'ємного заряду (ОНОЗ) та граничної *частоти існування* ВДП.

У *другому розділі* дисертації проаналізовано використовувані засоби моделювання електронних процесів у напівпровідниках. Вони отримані внаслідок усереднення кінетичного рівняння по k -станах у припущенні максвеллівського розподілу електронів з електронною температурою T_e . Використовуючи спрощення кінетичного рівняння наближенням *часів релаксації*, записано рівняння для концентрації, імпульсу та енергії. Для відповідних часів релаксації, необхідних для розв'язку цих рівнянь, отримано аналітичні співвідношення. У підсумку досліджувана модель являє собою систему релаксаційних рівнянь, які записуються для кожної долини і об'єднуються концентраційними рівняннями. Така модель добре протестована для «класичних» одноступінних та багатовисхідних напівпровідників на розрахунках параметрів та характеристик у сильних електричних полях. Зауважимо, що вхідні пара-

метри цієї моделі практично співпадають з такими для кінетичного моделювання методом Монте-Карло.

Суттєвою методичною відмінністю даної моделі від методу Монте-Карло та від існуючих подібних програм є те, що замість релаксаційного рівняння для енергії електрона використовується рівняння для *електронної температури* як міри їх *середньої* енергії і яке необхідне для розрахунків *полетемпературної характеристики*.

Далі у *третьому розділі* на основі розробленої моделі проведено аналіз *імпульсних властивостей* III-нітридів, продемонстровано деталі «сплеску» *дрейфової швидкості* та його особливості саме для сполук с азотом. Метод оцінки *високочастотної провідності* продовжує розділ, де наведено міркування щодо існування ВДП у багатодолинних напівпровідниках.

На завершення розділу надано опис *запропонованого нового методу* оцінювання граничних частот багатодолинних напівпровідників та новий, відмінний від класичних, метод оцінки за *спектральною характеристикою відгуку дрейфової провідності*.

У *четвертому розділі* практично використовується запропонований у третьому розділі метод розрахунку для отримання *імпульсних властивостей, високочастотної провідності* та граничної частоти за *спектральною характеристикою відгуку дрейфової провідності* для III-нітридів. Наведені опис спрощень та можливостей запропонованого підходу.

У *висновках*, відповідно, наведено головні результати та висновки роботи та їх порівняння з метою та завданням дослідження.

Проведений аналіз отриманих модельних значень оцінки верхніх граничних частот показав, що III-нітриди залишаються найбільш перспективними матеріалами напівпровідникової галузі на найближчий час.

Розділ

1. ОГЛЯД ХАРАКТЕРИСТИК ІІІ-НІТРИДІВ**1.1 Особливості напівпровідникових матеріалів** **$A^{III}B^V$ з азотом**

Нітридні напівпровідники в останні роки [23 – 25] викликають велику зацікавленість завдяки своїм винятковим властивостям, які не були виявлені у традиційних напівпровідниках, таких як кремній та арсенід галію, заборонена зона яких недостатньо велика для конструювання оптоелектронних приладів короткохвильового діапазону спектра [26 – 28] чи пристроїв для надшвидкої передачі сигналів, наприклад [29, 30, 31]. Більш того, прилади на основі арсеніду галію не можуть бути використані при високих температурах. Група ІІІ-нітридів, завдяки широкій забороненій зоні може бути використана у пристроях фіолетового, синього та зеленого спектрів випромінювання [32] та для високотемпературних транзисторів. Більш високі значення робочої напруженості електричного поля і підвищена теплопровідність дозволяють сподіватися на створення широкого спектру НВЧ та КВЧ потужних приладів.

Поява збірників довідкових даних [33 – 35] та комплексних досліджень та порівнянь [36, 37] продовжується до останнього часу, що підтверджує зацікавленість як науковців [38], так і технологів [39] чи промисловців [40].

Перспективність використання ІІІ-нітридів можна порівняти за рис. 1 [41] на якому прогноз розвитку доповнює фактичні дані з [42].

Більшість ІІІ-нітридних сполук з міждолинним переносом електронів недостатньо вивчені. Але знаючи поле-температурну, поле-швидкісну залежності й частотні властивості для декількох вже відомих сполук, можна будувати прогнози змін різних параметрів.

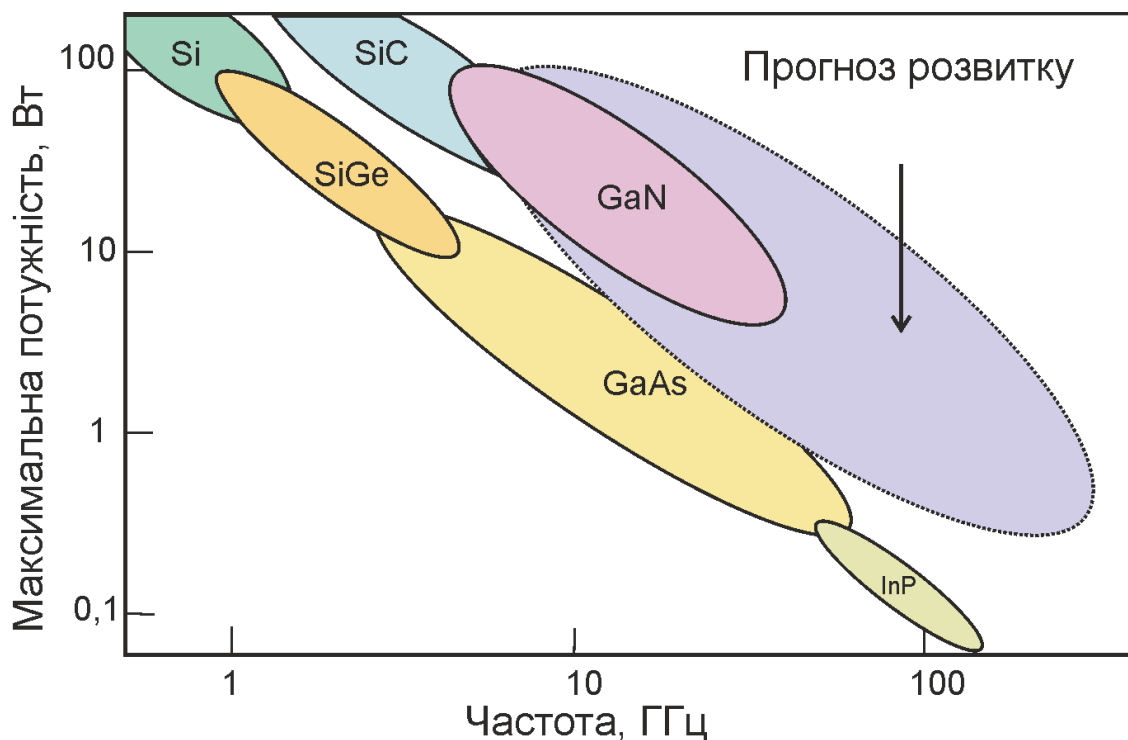


Рис 1. Напівпровідникові матеріали та перспективи їх використання. Статистичні данні [42], прогноз [41].

1.1.1 Зонна структура

Сполуки, що розглядаються в даній роботі – це група нітридів, різноманіття властивостей яких обумовлює їх широке використання у приладах і пристроях різного технічного призначення. Група III-нітридів відноситься до сполук типу $A^{III}B^V$, які утворюються у результаті взаємодії елементів III підгрупи періодичної таблиці бору, алюмінію, галію та індію з елементом V підгрупи азотом. Напівпровідникові сполуки $A^{III}B^V$ утворюють ряд гомологічного типу, у якому спостерігається відстежувана зміна багатьох властивостей при зміні атомних номерів компонентів. Усередині кожної групи сполук спостерігається зменшення ширини забороненої зони із зростанням сумарного атомного номера і атомних мас елементів, що входять у з'єднання. Це пояснюється сильнішим розмиттям «електронних хмар» ковалентних зв'язків у міру руху вниз по періодичній таблиці, завдяки чому посилюється металічний характер зв'язку. Одночасно з ослабленням ковалентних хімічних зв'язків знижується температура плавлення.

Це ілюструється рис. 2, де для кубічної структури кристалічної решітки представлені поверхні, що відповідають положенням дна зони провідності у точках симетрії Γ , L та X, побудовані за даними, наведеними в роботі [43]. Слід звернути увагу, що взаємне розташування Γ -, L- і X-долин може змінюватись залежно від хімічного складу. Прямозонними напівпровідниками будуть з'єднання індію та галію (окрім GaP). Сполуки алюмінію та фосфід галію мають дно зони провідності у точці X.

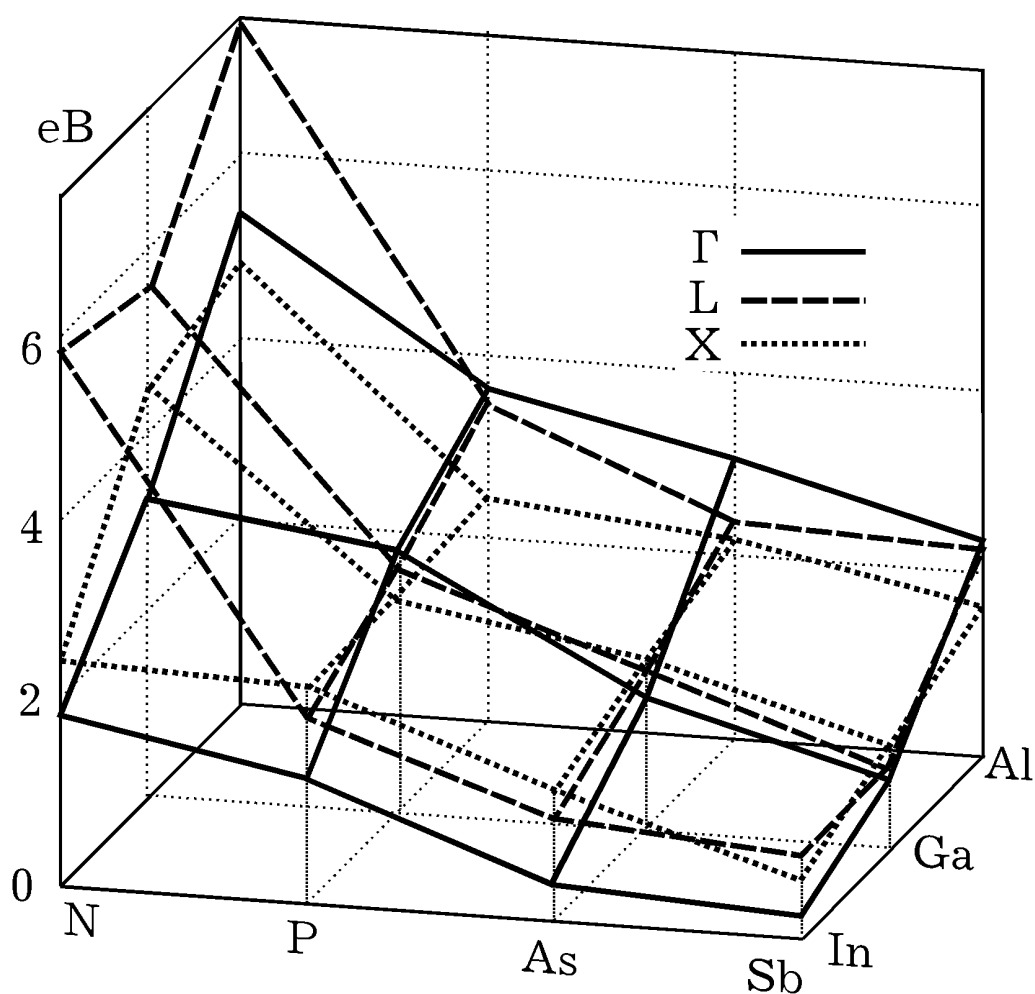


Рис 2. Залежності ширини забороненої зони у різних точках симетрії (Γ , L та X) зони Бріллюена від складу з'єднання

Група III-нітридів на відміну від більшості сполук $A^{III}B^V$, які кристалізуються тільки в решітку кубічного типу (цинкової обманки або сфалериту), може мати і інші модифікації кристалічної структури – гексагональну (типу вюрцит) [44] та структуру кам'яної солі.

Для гранецентрованої кубічної решітки типу цинкової обманки, як і алмазу, перша зона Бріллюена має вид октаедра із зрізаними вершинами (рис. 3). Її симетрія дозволяє задавати закон дисперсії тільки в межах 1/64 частини зони Бріллюена.

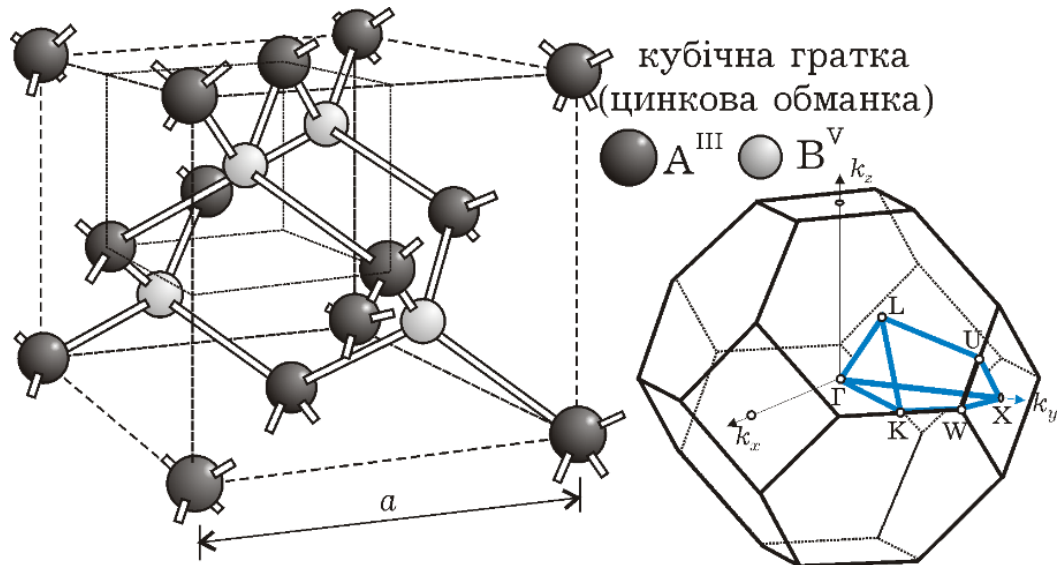


Рис 3. – Структура кубічної кристалічної решітки типу цинкової обманки та форма першої зони Бріллюена

Для нітридів характерна також структура гексагонального типу (вюрцит) (рис. 4). У решітках обох типів кожен атом елементу III групи знаходиться в оточенні тетраедра чотирьох атомів елементу V групи і так само навпаки. Структура цинкової обманки на відміну від структури алмазу не має центру симетрії. Ця особливість приводить до відмінності у властивостях поверхонь $[111]$ і $[1\bar{1}0]$, цілком складених з різнойменних атомів. Різна поведінка граней виявляється при травленні, окисненні та вирощуванні кристалів.

Як правило для групи III-нітридів зона провідності складається з декількох підзон з мінімумом в центрі зони Бріллюена $k<000>$ та кристалографічних напрямках $<111>$, $<100>$. Мінімум лежить в центрі зони – Γ -долина, в напрямках $<100>$ і $<111>$ - відповідно X- та L-долини (рис. 5). Виключення складає нітрид алюмінію з кубічною модифікацією кристалічної решітки, який є непрямоzonним напівпровідником і має мінімум не в центрі зони Бріллюена, а в кристалографічному напрямку $<100>$, тобто в X-долині. Δ_{GL} ,

$\Delta_{\Gamma X}$, $\Delta_{\Gamma L}$ – енергетичні зазори між долинами. При цьому положення абсолютного мінімуму за величиною залежить від конкретної сполуки.

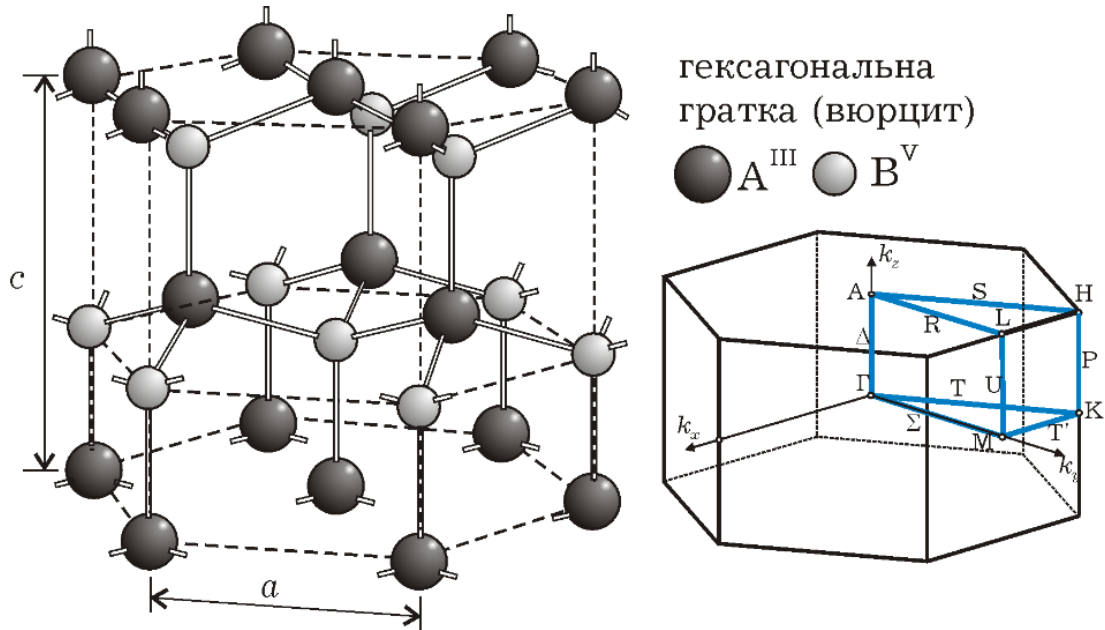


Рис 4. – Структура гексагональної кристалічної решітки типу вюрциту та форма першої зони Бріллюена

При розташуванні дна долин поблизу края зони Бріллюена еквівалентних X-долин три, еквівалентних L-долин чотири. При розташуванні ж дна долин всередині зони Бріллюена еквівалентних X-долин шість, еквівалентних L-долин вісім. Кожна з долина характеризується ефективною масою електронів біля дна зони m_{Γ} , m_X , m_L .

Нижче розглянуто особливості зонної структури окремих сполук групи III-нітридів.

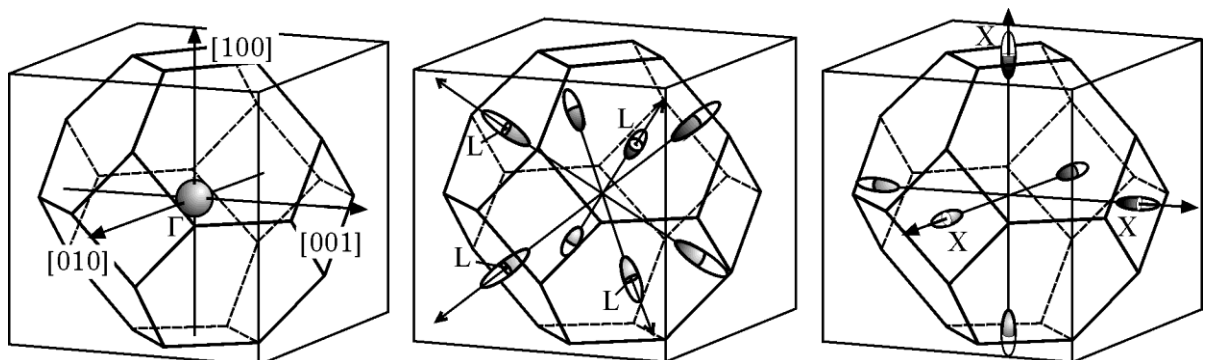


Рис 5. – Ізоенергетичні поверхні для нижчих долин. Γ -долина практично ізотропна

1.1.1.1 Нітрид індію (InN)

InN типу цинкової обманки є прямозонним напівпровідником і за структурою своєї дисперсійної кривої (рис. 6) подібний до кубічного GaN. Для кубічного нітриду індію характерна в зоні провідності в точках симетрії зони Бріллюена послідовність Γ -, X- та L-долини.

Абсолютний мінімум зони провідності лежить у центрі зони Бріллюена (точка Γ). Для InN відстань між екстремумами складає при нульовій температурі 2,0 еВ, зменшуючись до 1,9 еВ при кімнатній. Ефективна маса електрона поблизу абсолютного екстремуму (у Γ -долині) є скалярною величиною ($m^* = 0,35m$) [45].

Наступна X-долина знаходиться на енергетичній відстані $\Delta_{\Gamma X} = 0,57$ еВ в середині зони Бріллюена. Їй відповідають значення поздовжньої та поперечної ефективних мас: $m_l^* = 0,48m$, $m_t^* = 0,27m$. При цьому омічна ефективна маса $m_c^* = 0,32m$, ефективна маса густини станів з урахуванням кількості долин $m_d^* = 0,52m$. На рис. 6 зображено фрагменти дисперсійних кривих біля країв забороненої зони з параметрами, що використовувались при розрахунках, а також найменший елемент симетрії зони Бріллюена, з важливим напрямом та точками симетрії.

Структура зони провідності для гексагонального нітриду індію дещо складніша (рис. 6) та ще більш невизначена. У [46] наведена ширина забороненої зони, яка в залежності від температури має значення біля 2 еВ. За [47] це значення складає (0,65...0,7) еВ. Дну зони провідності відповідає центральна Γ_1 -долина з практично ізотропною ефективною масою, що дорівнює (0,04...0,07) m . Як і для гексагонального GaN, через відсутність точних експериментальних даних, літературні джерела розходяться щодо параметрів, а відповідно і послідовності долин у зоні провідності InN типу вюрциту.

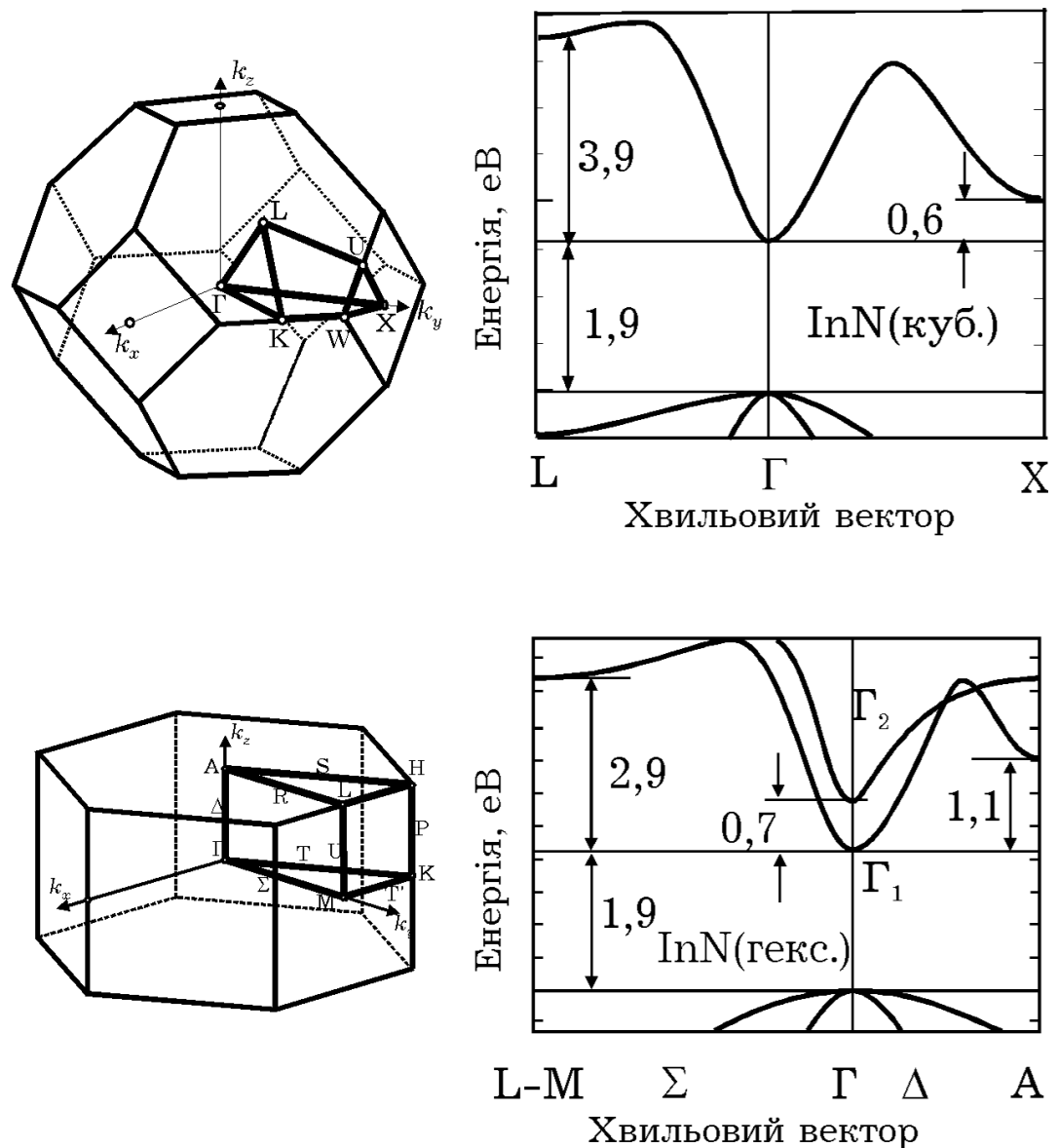


Рис 6. – Характерні точки та напрямки симетрії у першій зоні Бріллюєна та відповідні їм закони дисперсії для нітриду індію (InN) з кубічною та гексагональною кристалічною решіткою

Одні автори зазначають наступною Δ -долину, що знаходиться у Δ -напрямку на енергетичній відстані (0,7...2,7) eV. Інші вважають такою другу Γ_2 -долину, розташовану також у центрі зони Бріллюєна вище на (1,1...2,6) eV [45, 48]. Їм відповідає значна анізотропія ефективних мас $m_l^*/m_t^* = 0,84/0,16$, тому скалярне значення омічної ефективної маси

$m_c^* \approx 3m_t^*/2 = 0,24m$, а ефективна маса густини станів в одній долині $m_d^* = 0,28m$.

Констатують і наявність вищих долин у зоні провідності InN, що лежать між точками L і M на висоті $\Delta_{\Gamma ML} = (2,9 \dots 3,9)$ еВ [45], з ефективною масою густини станів з врахуванням усіх долин $1,08m$.

1.1.1.2 Нітрид галію (GaN)

GaN також має дві модифікації кристалічної структури: кубічну, або решітки типу «цинкової обманки», і гексагональну типу «вюрциту».

Для *кубічних* решіток взято параметри зонної структури, наведені в [49], для якої в зоні провідності в точках симетрії зони Бріллюена є Γ -, X- і L-долини (рис. 5).

Дну зони провідності відповідає центральна Γ -долина з ізотропною ефективною масою $m_\Gamma^* = 0,13m$. Наступні шість X-долин знаходяться на енергетичній відстані $\Delta_{\Gamma X} = 1,3$ еВ на краю зони Бріллюена. Їм відповідає помітна анізотропія ефективних мас $m_l^*/m_t^* = 0,5/0,3$. При цьому омічна ефективна маса $m_c^* = 0,35m$, а ефективна маса густини станів з врахуванням кількості долин ($M_X = 6/2$) складає $m_d^* = M^{2/3} \sqrt[3]{m_t^{*2} m_l^*} = 0,76m$. Більш високі L-долини знаходяться на 2,3 еВ вище, ніж Γ -долина.

Для *гексагональної* структури кристалічної решітки також характерно, що мінімум зони провідності знаходиться у центрі зони Бріллюена (рис. 7), де ефективна маса є ізотропною і складає $(0,19 \dots 0,21)m$ [48]. Але крім цього мінімуму, в центрі зони є ще одна Γ -долина, вища за першу на $(1,9 \dots 2,2)$ еВ. Проте, щодо положень верхніх долин у науковій літературі нема єдності: деякі автори вважають, що наступною є долина, розташована між точками L і M на висоті від 1,2 до 2,0 еВ, інші такою вважають A-долину – $(1,3 \dots 2,1)$ еВ [45].

Практично відсутня інформація щодо ефективної маси у верхніх долинах, іноді її приймають рівною звичайній масі. Ізотропна ефективна маса для верхньої Γ -долини складає $(0,9 \dots 1)m$ [47]. На рис. 7 зображено характерні фрагменти дисперсійних кривих у країв забороненої зони з параметрами, що використовувались при наступних розрахунках, а також найменший елемент симетрії зони Бріллюена, з типовими напрямками та точками симетрії.

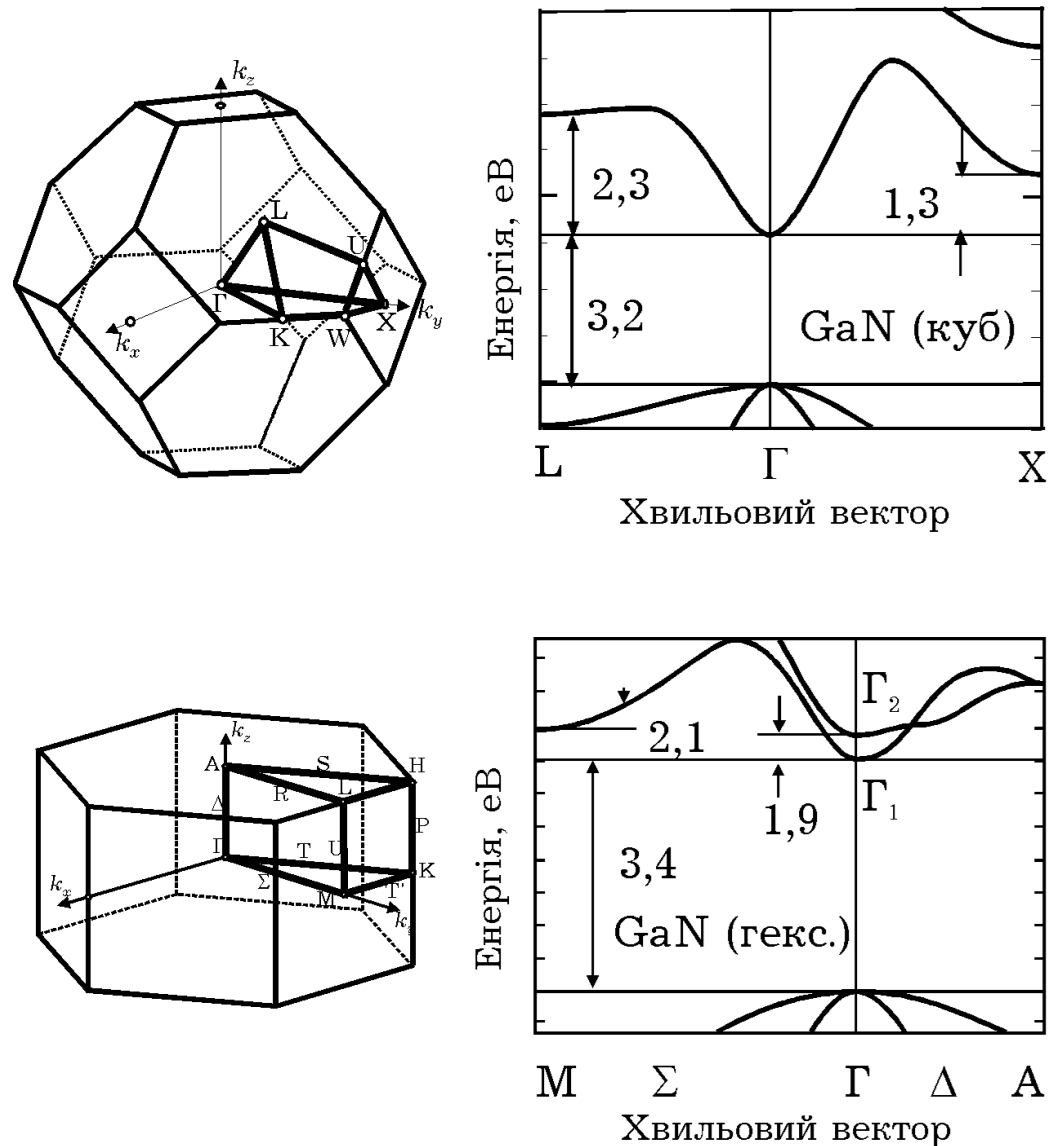


Рис 7. – Характерні точки та напрямки симетрії у першій зоні Бріллюена та відповідні їм закони дисперсії для нітриду галію (GaN) з кубічною та гексагональною кристалічною решіткою

1.1.1.3 Нітрид алюмінію (AlN)

Так само, як і нітрид галію, AlN кристалізується як у структуру цинкової обманки, так і у гексагональну структуру типу вюрциту.

Кубічний нітрид алюмінію на відміну від нітриду галію є непрямозонним напівпровідником (рис. 8), тобто абсолютний мінімум зони провідності лежить не в центрі зони Бріллюена, а відповідає кристалографічному напрямку $\langle 100 \rangle$ (X-долина) на відстані 4,9 еВ від максимуму валентної зони [47]. На рис. 8 зображено фрагменти дисперсійних кривих біля країв забороненої зони з параметрами, що використовувались при наступних розрахунках, а також найменший елемент симетрії зони Бріллюена, з типовими напрямками та точками симетрії.

Ширина забороненої зони, що відповідає центральній Γ -долині, складає приблизно 6 еВ, в ній ефективна маса є ізотропною і дорівнює $0,4m$. На енергетичній відстані $\Delta_{\Gamma L}$ біля 4,0 еВ знаходяться ще 4 еквівалентних L-долини. Анізотропія ефективної маси в них виражена практично так само, як і для GaN ($m_l^* = 0,53m$, $m_t^* = 0,35m$) [49], тому скалярне значення омічної ефективної маси $m_c^* = 0,4m$. Ефективна маса густини станів електронів в зоні провідності $m_d^* = 4^{2/3} (m_t^{*2} m_l^*)^{1/3} \approx 0,79m$. Енергія електронної спорідненості складає лише 0,6 еВ [45].

Решітка типу *вюрциту* AlN має закон дисперсії (рис. 8), який у загальних рисах подібний до гексагонального нітриду галію і є прямозонним напівпровідником, на відміну від своєї кубічної модифікації.

Ще однією особливістю нітриду алюмінію є його ширина забороненої зони, яка становить в центрі зони Бріллюена 6,2 еВ (Γ -долина) [49]. Нітрид алюмінію є найширокозоннішим напівпровідником сполук A_3B_5 . На енергетичній відстані 0,7 еВ знаходиться наступна L-M-долина. Враховуючи, що

для вюрцитної модифікації AlN $m_l^* = 0,35m$, $m_t^* = 0,29m$, то ефективна маса густини станів в одній долині дорівнює $0,17m$ [49]. Також на краю зони Бріллюена, але в Δ -напрямку на відстані 1,0 еВ лежать шість еквівалентних К-долин

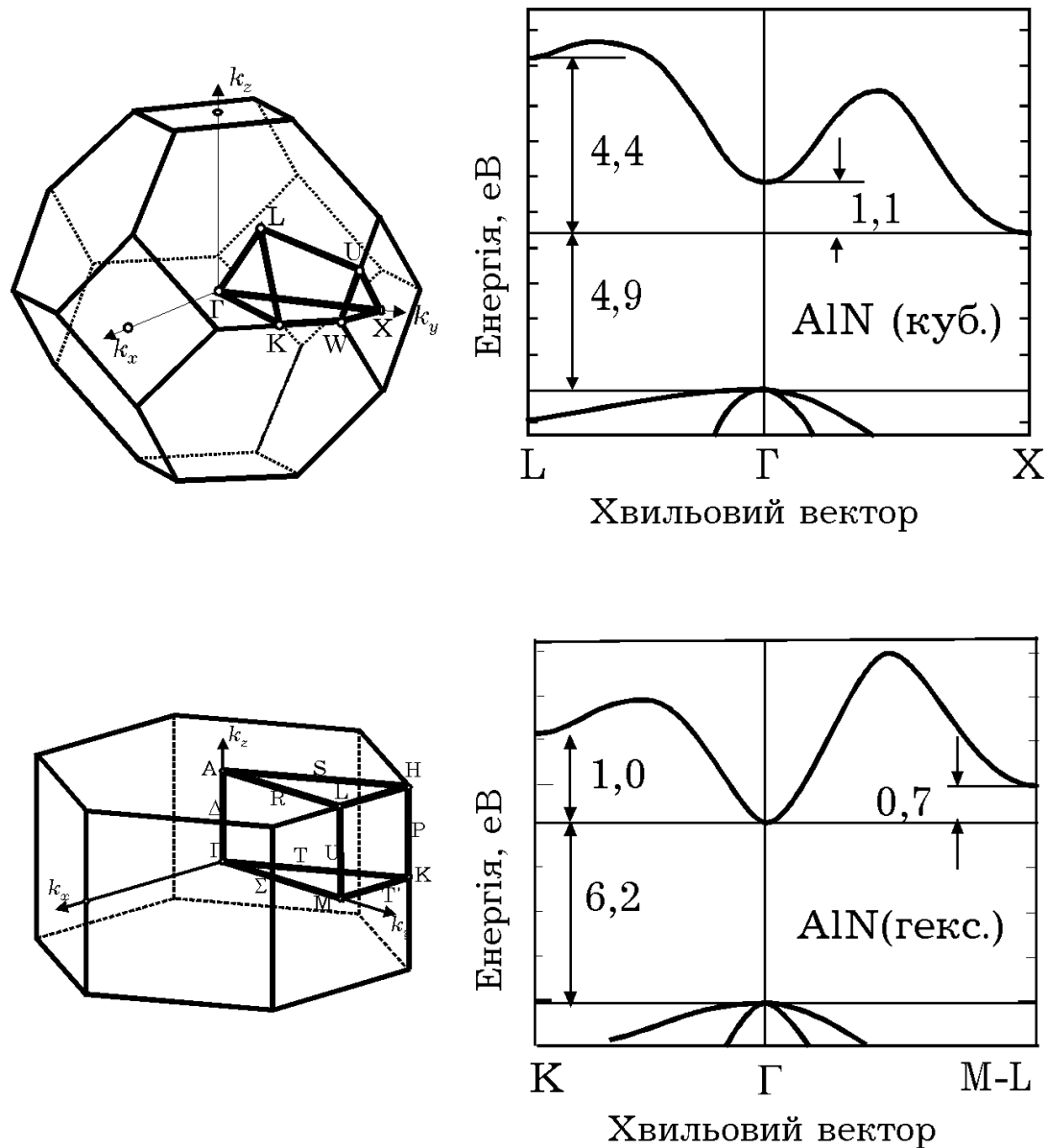


Рис 8. – Характерні точки та напрямки симетрії у першій зоні Бріллюена та відповідні їм закони дисперсії для нітриду алюмінію (AlN) з кубічною та гексагональною кристалічною решіткою

з ефективною масою густини електронних станів з урахуванням всіх долин $1,02m$. Енергія електронної спорідненості складає лише 0,6 еВ [45]. Зважаю-

чи на те, що нітрид алюмінію викликав загальну зацікавленість своєю шириною забороненої зони і виключними електронними властивостями порівняно недавно, тому і відомості щодо зонної структури нітриду алюмінію в літературі часто різняться.

1.1.2 Спектр фононів.

Ще одна невизначеність існує в довідниковій літературі щодо енергій оптичних та міждолинних фононів. На рис. 9 наведено взяті з [45] фононні закони дисперсії для гексагональної структури нітридів, а для кубічної – тільки для нітриду галію.

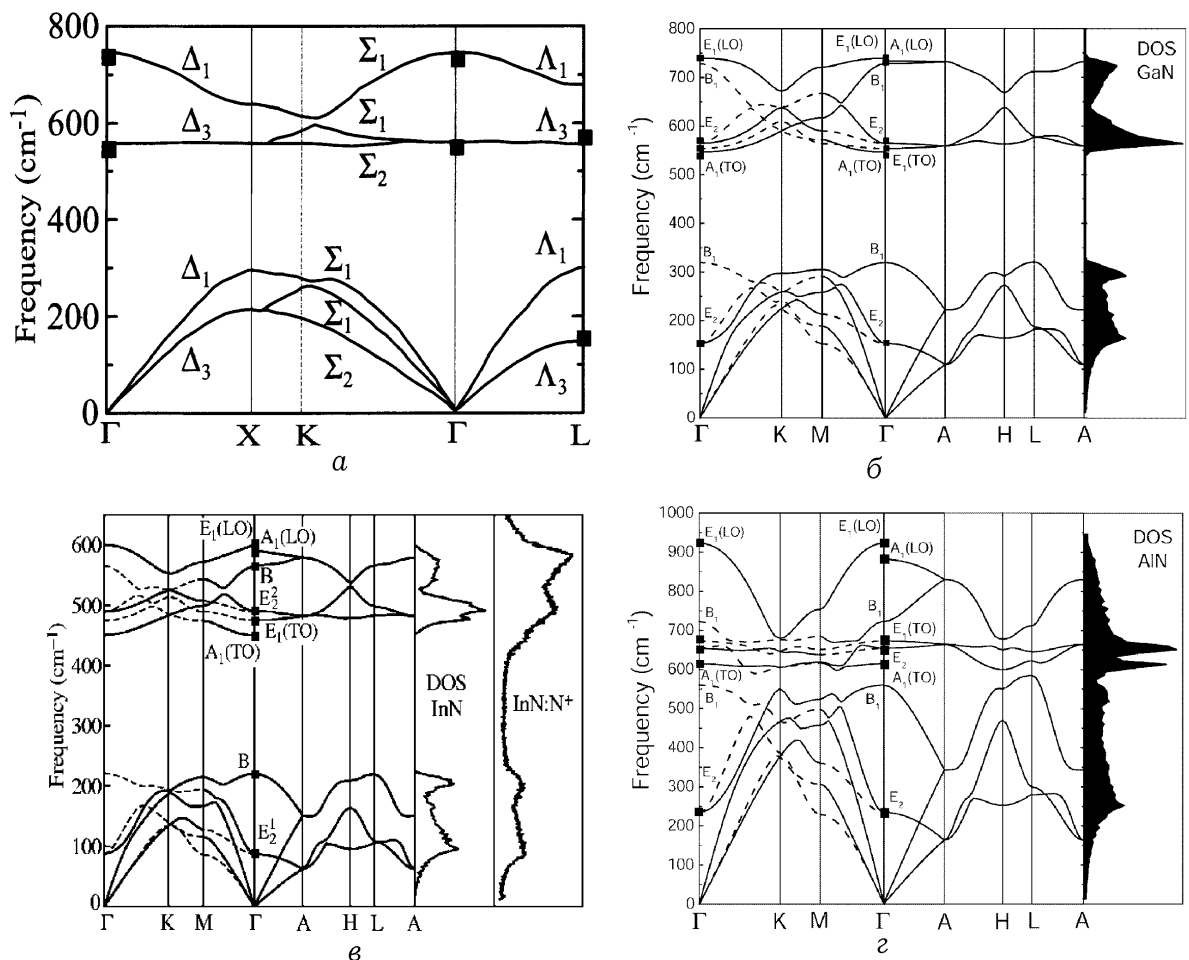


Рис 9. – Фононні спектри для кубічного (а) і гексагонального (б) GaN та гексагональних InN (г) і AlN (з)

Найпоширенішим для моделювання є вибір енергії оптичних фононів, що відповідає гілці поздовжніх оптичних фононів (LO) в центрі зони Бріллюена.

Але у розсіюванні на оптичному деформаційному потенціалі приймають участь також і більш короткохвильові фонони. Що стосується міждолинних фононів, то, наприклад, в [50] для моделювання методом Монте-Карло їх величину взято таку ж, як і оптичних. Але міждолинне розсіяння можуть викликати і акустичні фонони біля краю зони Бріллюена, тому енергію міждолинних фононів зазвичай обирають як деяку усереднену для оптичних та акустичних короткохвильових фононів.

Ще одне зауваження можна зробити щодо участі у фонових механізмах розсіювання поздовжніх та поперечних фононів, особливо для гексагональних структур. Оскільки в загальноприйнятих теоріях розсіювання не розглядається його анізотропія, то можна і висловити сумніви щодо врахування тільки поздовжніх фононів і обирати енергію фононів як середню з усього спектру оптичних гілок.

1.1.3 Параметри матеріалів, що використано при моделюванні.

Значення параметрів матеріалів узято переважно з оглядових статей [43, 49, 51] та книг [52 – 54]. Необхідно враховувати, що в довідковій літературі іноді спостерігається суттєва невизначеність у значеннях окремих констант. Це стосується у першу чергу міждолинних відстаней, оптичного та акустичного деформаційних потенціалів, значень ефективних мас, а також констант міждолинного зв'язку.

Приклад такої невизначеності [55] – автори пропонують використовувати принципово менше значення міждолинної відстані для InN.

Оскільки у роботі [56] отримано задовільні результати моделювання поле-швидкісних та поле-температурних характеристик для значень параметрів матеріалів та їх зонної структури, обрані при розрахунках параметри наведені у Табл. 1. Їх можна рекомендувати для використання при моделюванні структур і приладів на основі III-нітридів.

Табл. 1. Обрані для моделювання параметри InN, GaN та AlN.

Параметр	InN		GaN		AlN	
	куб.	гекс.	куб.	гекс.	куб.	гекс.
Діелектрична проникність:						
статична, $\epsilon_{ст}$	14,86	15,3	9,6	8,9	8,41	9,14
високочастотна, $\epsilon_{в}$	8,04	9,3	5,5	5,35	5,32	4,84
середня, ϵ	11,0	12,2	9	6,5	7,5	7,2
Енергія іонізації, eV	0,005		0,013		0,019	
Густина, 10^3 кг/м^3	6,81		6,15		3,26	
Швидкість звуку (поздовжня), 10^3 м/с	5,2	6,56	4,57	6,56	6,56	
Акустичний деформаційний потенціал, eV	5,0	4,1	5,0	8,3	9,4	8,0
Константа міждолинного зв'язку, 10^{10} eV/м	8	10	11,1	10	11,1	
Енергія оптичних фононів, eV	0,03	0,057	0,059	0,073	0,062	0,055
Енергія міждолинних фононів, eV	0,041	0,073	0,05	0,05	0,08	0,08
Міждолинні відстані, eV	$\Delta_{ГХ}=0,57$ $\Delta_{ГЛ}=3,88$ $\Delta_{LX}=3,31$	$\Delta_{ГА}=0,7$ $\Delta_{ГІ}=1,1$ $\Delta_{ГІА}=0,4$	$\Delta_{ГХ}=1,1$ $\Delta_{ГЛ}=1,9$ $\Delta_{XL}=0,6$	$\Delta_{ГІLM}=2,1$ $\Delta_{ГІГ2}=1,9$ $\Delta_{Г2LM}=0,2$	$\Delta_{ГХ}=1,1$ $\Delta_{ГЛ}=4,4$ $\Delta_{LX}=3,3$	$\Delta_{ГML}=0,7$ $\Delta_{ГК}=1,0$ $\Delta_{MLK}=0,3$
Ефективні маси:						
нижні долини	0,64 m	0,4 m	0,15 m	0,2 m	0,17 m	0,14 m
	0,64 m	0,5 m	0,15 m	0,21 m	0,2 m	0,45 m
	0,64 m	1,09 m	0,15 m	0,45 m	0,25 m	0,55 m
верхні долини	0,48 m	0,8 m	0,35 m	0,35 m	0,6 m	0,8 m
	0,41 m	1 m	0,36 m	0,91 m	0,65 m	1 m
	1,16 m	3,5 m	1,7 m	2,7 m	2,8 m	2,8 m

1.2 Огляд та порівняння засобів моделювання

Достатньо ґрунтовний огляд наведено у [41]. Серед методів, придатних для фізико-топологічного моделювання є методи, базовані на кінетичному рівнянні та релаксаційних рівняннях.

Найбільш точні кількісні моделі електронних процесів за наявності зовнішніх впливів, зокрема й динамічних, можуть бути створені на основі кінетичного рівняння. Воно у загальному випадку являє собою інтегродиференціальне рівняння, за допомогою якого може бути знайдена функція розподілу частинок, а отже, й усі середні величини, що характеризують поведінку колективу частинок.

Кінетичне рівняння є дуже потужним засобом статистичного опису поведінки великих колективів частинок, тому що отримувана в результаті його розв'язання функція розподілу дозволяє досить детально аналізувати фізичні процеси перенесення носіїв у реальних електронних приладах. За своєю фізичною природою кінетичне рівняння є класичним, але надаючи тим чи іншим параметрам відповідного квантового змісту, можна отримати напівкласичний опис фізичних процесів, що враховує квантові ефекти.

Кінетичне рівняння дозволяє спостерігати зміну функції розподілу за тих чи інших умов, а конкретний вид функції визначається статистичними властивостями колективу частинок.

Як чисельну реалізацію розв'язання кінетичного рівняння часто використовують *метод Монте-Карло*. У загальному випадку цією назвою позначають значну групу обчислювальних методів, що використовують випадкові числа. Стосовно електроніки цей метод, який іноді називають *методом частинок* [57], використовують для моделювання колективних ефектів перенесення зарядів у різноманітних плазмових (твердотільних або газових) структурах через поведінку окремих частинок: їхній балістичний рух на вільному пробігу й розсіювання після зіткнень.

Відомі два різновиди методу Монте-Карло: *одночастинковий* і *багаточастинковий*.

В *одночастинковому* методі [53] моделюється рух однієї частинки протягом проміжку часу, досить довгого для надійного статистичного усереднення. У *багаточастинковому* методі розглядається поведження великої кількості частинок, а розподіли параметрів, що цікавлять (енергії, швидкості, концентрації і под.), знаходять усередненням за ансамблем випадкових реалізацій цих параметрів. Досить надійною для усереднення вважається кількість частинок порядку $10^4 \dots 10^5$.

Очевидно, що для застосування одночастинкового методу зовнішні умови, чи, іншими словами, *діючі сили*, мають залишатися постійними протягом усього обчислювального експерименту. Саме тому він природньо придатний для аналізу кінетичних ефектів лише для статичних полів.

Для аналізу динамічних процесів доречно використовувати багаточастинковий метод Монте-Карло. У ньому, як зазначалося, електронна плазма в напівпровіднику уявляється деяким ансамблем модельних частинок, кількість яких істотно менша, ніж реальних.

На поточний момент саме чисельне моделювання Монте-Карло [57, 53] – найбільш поширений метод моделювання, який іноді вважають близьким до натурного експерименту. Застосування методу до досліджуваних у роботі Ш-нітридів розпочалося ще 20 років тому [50], але залишається актуальним у дослідників до теперішнього часу [48].

Повністю підтримуючи застосовність методу та його безумовні переваги, хочемо зауважити, що надлишкова інформативність та, час від часу, важкість інтерпретації фізичного змісту явищ за його допомоги, залишають можливість і доречність існування іншого підходу до моделювання [59, 60, 14].

Особливо зручно застосовувати метод Монте-Карло до твердотільних структур, коли характерні розміри структур становлять мікрметри й менше. Для довших потрібно моделювати поведження більшої кількості частинок протягом триваліших інтервалів часу, що вимагає додаткових ресурсів.

Для коротших слід враховувати низку додаткових ефектів – скінченний час зіткнень, квантові ефекти, інші види розсіювання тощо.

У практиці моделювання динамічних властивостей приладів широко використовують *гідродинамічну модель*, основану на поданні електронного колективу у вигляді «нестискуваної рідини», для якої можна припустити, що $\text{div} \vec{v} = 0$. Це припущення дозволяє отримати систему рівнянь *дрейфово-дифузійної моделі* [41], які, у свою чергу, дозволяють розраховувати розподіли концентрації носіїв і електричного поля, а за ними значення швидкості носіїв, розподіл густини струму і відповідно значення струму електродів приладу. Для сильних електричних полів така модель має обмежені можливості. У деяких випадках можна використовувати в тому або іншому вигляді апроксимації залежностей рухливості й коефіцієнта дифузії від напруженості електричного поля. Але за своєю суттю ця система є «локальною» моделлю струмоперенесення, в якій швидкість носіїв визначається локальним значенням напруженості поля. Вона не може описувати ефектів сплеску дрейфової швидкості, ефектів накопичення носіїв через зміну їх енергії та ефективної маси в разі переходу у верхні долини.

Моделі традиційних електронних компонентів належать переважно до класу дрейфово-дифузійних; використовуючи їх можна досить точно розраховувати характеристики пристроїв традиційної мікроелектроніки. Однак під час виведення цих моделей враховувалося, що характерні розміри компонентів перевищують довжину вільного пробігу в сотні та більше разів.

Якщо ж ця умова не виконується, то самі поняття дрейфу та дифузії втрачають сенс, використання моделей стає необґрунтованим, а їх результати перестають узгоджуватися з експериментальними даними.

Хорошим компромісом між фізичною адекватністю, притаманною кінетичному рівнянню, та трудомісткістю процесу статистичного моделювання може служити перехід до детермінованих рівнянь, які отримують усередненням кінетичного рівняння (*метод моментів* в англomовній літературі) по швидкості у функції розподілу. У результаті отримуємо диференціальні рів-

няння для середніх величин в частинних похідних, де залежність тільки від часу та координат. Ця процедура суттєво спрощується, якщо кінетичне рівняння обрати у наближенні часу релаксації. Для розв'язку цих рівнянь потрібно усереднюючи швидкості розсіювання, які використовуються у методі Монте-Карло, знайти часи релаксації для різних видів розсіювання.

Додаткового уточнення потребують методи знаходження часів релаксації та усереднення, що використовують інші науковці. Так у [50, 58, 61] використовують значення часів релаксації, що не враховують особливостей сильних полів, чи існування будь-яких механізмів розсіювання, окрім акустичного [48].

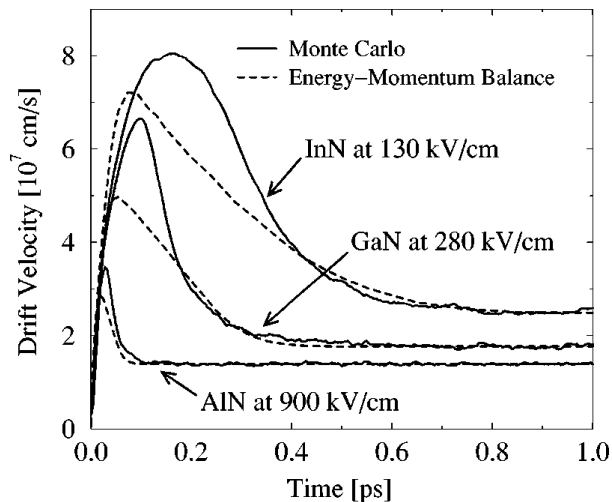


Рис 10. – Результати порівняння моделювання швидкості дрейфу методами кінетичного рівняння Монте-Карло та релаксаційних рівнянь з [57]. Розбіжність викликана некоректним використанням рівнянь релаксації енергії

Рис. 10 з [50] з першого погляду демонструє нам слабкість методу релаксаційних рівнянь і необхідність використання метода Монте-Карло, однак детальний аналіз опису моделі призводить до інших висновків. З нашої точки зору автори некоректно використовують визначення часів релаксації енергії за *статичними* характеристиками напівпровідникових матеріалів.

Саме врахування впливу ефектів сильних полів із збереженням відносної простоти і фізичного змісту методу релаксаційних рівнянь складає головні вдосконалення та наукову новизну обраного методу моделювання.

1.3 Існуючі методи оцінювання граничних частот

ІІІ-нітридів

Питання динамічних, зокрема високочастотних, властивостей напівпровідників виникає під час конструювання багатьох електронних компонентів.

Свідомий вибір конкретного матеріалу для практичного використання спирається на порівнянню та інженерно важливу характеристику. Неодмінне збільшення вимог до швидкості пристроїв органічно призводить сучасного стану, що такою характеристикою стає частотна характеристика матеріалів.

Оцінка граничних частотних можливостей струмопереносу можливо провести на основі різних підходів та за різними критеріями. Зокрема, у [62] чисельним моделюванням методом Монте-Карло для змінного електричного поля визначається гранична частота за еталоном досягнення найбільшого ККД на першій гармоніці струму. Практичне використання цього методу для ІІІ-нітридів наведено у [63 – 65].

Критерії вибору частотних властивостей матеріалу можуть бути різними. Одним з можливих підходів є оцінка частоти існування від'ємної динамічної провідності [66], де проведено аналітичні розрахунки частотної характеристики комплексної провідності.

Не заперечуючи наведені вище два підходи, ми пропонуємо ще один. Він базується на визначенні реакції дрейфової швидкості носіїв на дію імпульсу електричного поля. Справді це рішення системи диференціальних рівнянь, що укладається з рівнянь релаксації для збереження імпульсу, енергії та концентрації носіїв на основі часів релаксації для існуючих типів розсіювання з подальшим аналізом Фур'є перетворення дрейфової швидкості.

Наведемо відповідні співвідношення у наступних главах.

1.3.1 Ідеалізований режим обмеження накопичення об'ємного заряду (ОНОЗ) та частота першої гармоніки

Одним із можливих методів оцінки частотних можливостей матеріалу можна вважати розрахунок ефективності генерації у одноконтурному резонаторі з діодом [63 – 65].

Перш за все зауважимо, що усі подальші розрахунки та моделі можливо використовувати тільки у режим обмеження накопичення об'ємного заряду (ОНОЗ). Як відомо [67], головна ознака режиму, це відсутність домену току через діод.

Проілюструємо залежність току у резонаторі з діодом від вольт-амперної характеристики діода та напруженості зовнішнього поля рис. 11.

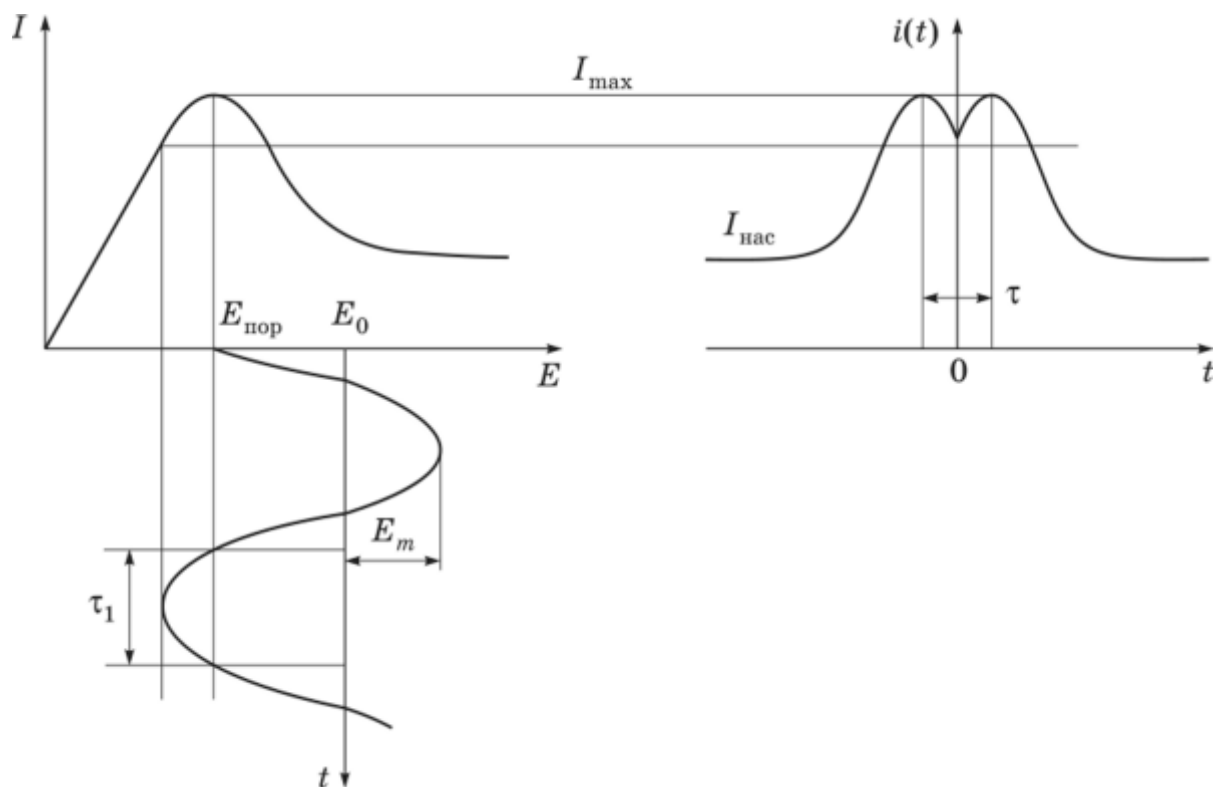


Рис 11. – Режим ОНОЗ

У такому режимі відсутня залежність частоти коливань контуру від часу прольоту електронів скрізь діод і, відповідно, від його розмірів. Зрозуміло,

що критерії існування ОНОЗ мають обмеження як знизу (період коливань повинен бути більше, щоб встиг зникнути домен, що формується), так і зверху (період менший за час релаксації). Це можливо описати виразом (1.1)

$$\frac{\varepsilon}{4\pi e n \mu^+} \ll T < \frac{(2..3)\varepsilon}{4\pi e n \mu^-} \quad (1.1)$$

де μ^+ та μ^- – рухливість на зростаючій ділянці та на ділянці ВДП відповідно.

У режимі генерації подамо електричне поле у формі $E(t) = E_0 + E_m \sin \omega t$ за умов $E_0 > E_{nop}$ та $E_0 - E_m > 0$. Тоді струм через діод дорівнює $I(t) = en_0 V(E(t))$.

Для розрахунку ефективності генерації можливо використати наступний метод. Розкладемо струм в ряд Фур'є, завдаємо постійну складову струму та амплітуду першої гармоніки:

$$I(E_0) = \frac{1}{T} \int_0^T I(t) dt \quad (1.2)$$

$$I_1 = \frac{2}{T} \int_0^T I(t) \sin \omega t dt \quad (1.3)$$

З використанням (1.2) та (1.3) вираз для обчислення ККД приймає вигляд

$$\eta = \frac{P_{\sim}}{P_0} = \frac{E_1 \int_0^T V[E(t)] \cos(\omega t) dt}{E_0 \int_0^T V[E(t)] dt} \quad (1.4)$$

У [63 – 65] розраховано та побудовано залежності ефективності генерації від частоти за (1.4). Розрахунки зроблено методом Монте-Карло, а результати наведені на рис. 12.

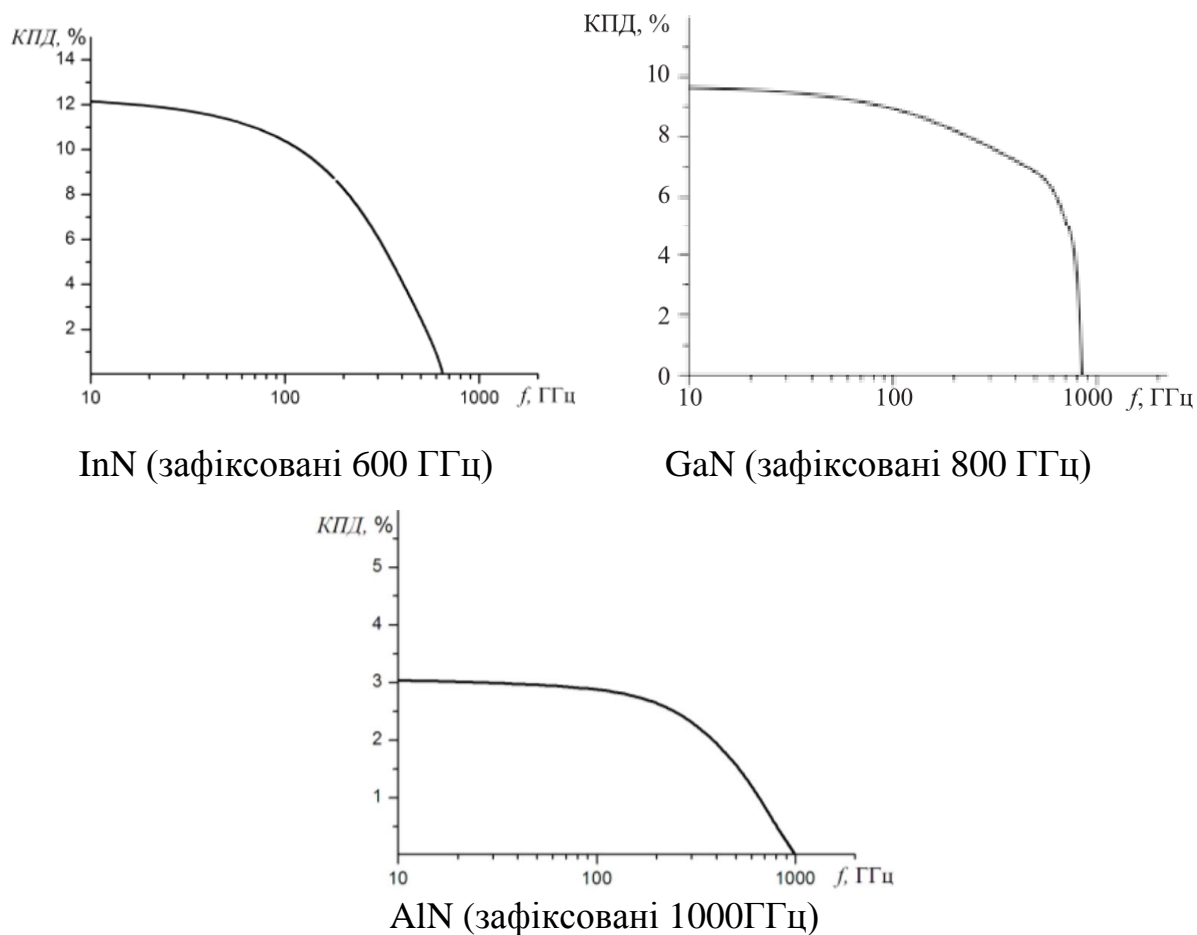


Рис 12. Частота першої гармоніки за наявності генерації. [61 – 63]

Результати моделювання доводять можливість генерування діодів на III-нітридах на частотах до 600 ГГц, 800 ГГц та 1000 ГГц для InN, GaN та AlN відповідно. Але за умови ідеальності матеріалу та діоду, без врахування доменів сильного поля та заряджених шарів чи неоднорідностей поля чи концентрацій. Відповідно реальні частоти будуть нижчими.

1.3.2 Метод граничної частоти існування ВДП.

У твердих тілах функція розподілу носіїв струму по енергіях під дією сильного електричного поля відхиляється від рівноважної функції розподілу. Відбувається «розігрівання» електронного (або діркового) газу. Це явище лежить в основі цілого ряду цікавих фізичних ефектів. Найважливіший з них – нелінійність вольтамперної характеристики твердого тіла в сильних полях.

Найбільш сильним проявом цього ефекту є поява на ВАХ однорідного зразка спадної ділянки, на якій диференціальна провідність dj/dE - від'ємна величина. Характеристику називають S-подібною, якщо густина струму - багатозначна функція поля, і N-подібною, якщо струм - однозначна, але немонотонна функція поля.

Падаюча гілка на ВАХ виникає в кожному випадку в силу певних особливостей або енергетичного спектру носіїв струму - електронів або/та дірок, або їх взаємодії з фононами, домішками, а також між собою.

Інтерес до цього кола явищ особливо посилився після відкриття генерації НВЧ коливань у деяких напівпровідниках - ефекту Ганна [68].

Логічним методом оцінювання частотних характеристик окремого напівпровідникового матеріалу можна вважати отримання максимальної частоти існування від'ємної диференційної провідності (ВДП), а отже і можливості генерації з використанням ефекту Ганна [60].

У наступних главах буде наведено можливе використання нашої аналітичної моделі як взагалі для широковідомих напівпровідників групи $A^{III}B^V$ на прикладі GaAs [2], так і для актуальних III-нітридів [8] для розрахунків максимальних частот існування ВДП.

1.4 Висновки до розділу 1

- Аналіз існуючих засобів для моделювання фізичних процесів у напівпровідниках показав перевагу методів, які ґрунтуються на кінетичному рівнянні. Серед них привертає увагу метод релаксаційних рівнянь своєю достатньою інформативністю та відносно простою реалізацією. Він дозволяє моделювати процеси електронного транспорту у багатодолинних напівпровідниках у сильному електричному полі.

- Розглянуті два найбільш відомих методи аналізу частотних властивостей провідності придатні для відносно специфічного режиму існування ВДП. Для більш широкого вжитку необхідно використовувати інші методи, які аналізують частотні можливості напівпровідників за іншими критеріями.

- Проведено огляд особливостей напівпровідникових матеріалів $A^{III}B^V$ з азотом. Розглянуто сучасний стан вхідних параметрів матеріалів та обрано параметри, що потрібні для моделювання у наступних розділах.

- Окремо зауважимо, що аналіз наявних експериментальних даних, а зокрема деяка їх суперечливість, можна вважати доказом необхідності подальшого вивчення особливостей матеріалів. Саме цій меті присвячені наступні дослідження.

Розділ

2. ЗАСОБИ МОДЕЛЮВАННЯ

На сучасному рівні розвитку моделювання електронних процесів у напівпровідниках потребує кількісної та інформативної моделі врахування динамічних зовнішніх впливів та актуальну методику розрахунків [57]. При цьому параметрами моделі повинні бути властивості матеріалу (селективність моделі) та широкий діапазон зовнішніх чинників (практичність моделі).

2.1. Загальний опис методу

Побудова моделей можлива з використанням кінетичного рівняння. Головна мета подібного інтегро-диференціального рівняння – знаходження функції розподілу часток за станами. Отримавши розподіл часток та обравши метод усереднення можливо оперувати середніми для усього ансамблю параметрами. Що дозволяє від параметрів окремих часток перейти до макрочарактеристик всього матеріалу. Це у свою чергу дає можливість прогнозувати поведінку реальних виробів з матеріалу, вживаних на практиці пристроїв.

2.1.1 Метод кінетичного рівняння

Стан електронного колективу можливо описати функцією розподілу $N(\vec{r}, \vec{k}, t)$. Ця функція може бути подана у вигляді добутку функцій ймовірності заповнення конкретного стану $f(E(k)) = dn / dn_c$ та густини станів у k -просторі $g(k) = dn_c / dV_k$ [41].

Функція густини станів приймає вигляд $g(k) = 2V / (2\pi)^3$ якщо залишаються діючими висновки зонної теорії, а ймовірнісний множник можна взяти подібним до функції Фермі-Дірака. Треба зауважити, що енергія електронів

за цих умов стає функцією часу, а просторову неоднорідність можна урахувати з використанням *локальної температури* $T_e(\vec{r})$.

Ця температура не є ані температурою дірок чи електронів, ні навколишнього середовища чи речовини. Для відповідності формальним параметрам функції Фермі-Дірака використовують енергетичні квазірівні Фермі $E_{\phi n}(\vec{r})$ чи $E_{\phi p}(\vec{r})$ відповідно для електронів та дірок.

Враховуючі наведене отримаємо

$$N(\vec{r}, \vec{k}, t) = \frac{d^2 N}{dV \cdot dV_k} = \frac{g(\vec{k})}{\exp\left(\frac{E(\vec{k}(t)) - E_{\phi n}(\vec{r})}{k_B T_e(\vec{r})}\right) + 1} \quad (1.5)$$

Значно спростити вирази та розрахунки можливо обмежившись одиничним об'ємом $V = 1$, що дає $g(k) = 1/4\pi^3$ [69].

Знання функції розподілу дозволяє знайти основні макроскопічні характеристики колективу. Наприклад, інтегрування її за k -простором дає розподіл концентрації частинок у геометричному просторі:

$$n(\vec{r}, t) = \int_{V_k} N(\vec{r}, \vec{k}, t) dV_k \quad (1.6)$$

і відповідно розподіл густини об'ємного заряду $\rho(\vec{r}, t) = -en(\vec{r}, t)$.

Усередненням швидкості в k -просторі за функцією розподілу можна знайти середню дрейфову швидкість спрямованого руху частинок:

$$\vec{v}_{\text{ДР}}(\vec{r}, t) = \frac{1}{n(\vec{r}, t)} \int_{V_k} \vec{v} N(\vec{r}, \vec{k}, t) dV_k \quad (1.7)$$

а отже, й розподіл густини струму:

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = -en(\vec{r}, t) \vec{v}_{\text{ДР}}(\vec{r}, t) = -e \int_{V_k} \vec{v} N(\vec{r}, \vec{k}, t) dV_k \quad (1.8)$$

Подібним чином можна знайти і локальне середнє значення будь-якої фізичної величини.

Тут необхідно звернути увагу на вибір меж інтегрування. В інтегралах (1.6)-(1.8), записаних для загального випадку, інтегрування проводиться за всіма можливими значеннями хвильового вектора. Для електронів у періодичному полі кристалічної ґратки областю неповторюваних значень квазіхвильового вектора є зона Бріллюена, причому інтегрувати треба за станами, які відповідають тій самій енергетичній зоні. Більше того, інколи інтегрують за якою-небудь характерною ділянкою дисперсійної кривої, визначаючи концентрацію або середні значення для частинок того чи іншого виду. Так, наприклад, можуть бути знайдені концентрація й параметри електронів у Γ -, X- або L-долині зони провідності, «важких» чи «легких» дірок валентної зони.

Кінетичне рівняння основане на тому, що в замкненій системі кількість частинок зберігається незмінною, тобто $N = \text{const}$, чи іншими словами

$$dN(\vec{r}, \vec{k}, t) / dt = 0 \quad (1.9)$$

Більш строго рівняння (1.9) можна довести на основі теореми Ліувілля, розглянутої у статистичній механіці. Співвідношення (1.9) є базою для формулювання кінетичного рівняння, яке у свою чергу надає змогу знайти зміну функції розподілу за заданого впливу на частинки. Зазначимо, що кінетичне рівняння записують звичайно окремо для колективів частинок різного виду (електронів конкретної зони, фононів, дірок та так далі).

Наведемо це рівняння для електронів. Оскільки функція розподілу N – функція трьох змінних, дві з яких векторні, то

$$\frac{dN}{dt} = \frac{\partial N}{\partial t} + \frac{\partial N}{\partial \vec{r}} \frac{d\vec{r}}{dt} + \frac{\partial N}{\partial \vec{k}} \frac{d\vec{k}}{dt} \quad (1.10)$$

Тут для стислості запису позначено:

$$\frac{\partial N}{\partial \vec{r}} = \vec{e}_x \frac{\partial N}{\partial x} + \vec{e}_y \frac{\partial N}{\partial y} + \vec{e}_z \frac{\partial N}{\partial z} = \text{grad}_r N \quad (1.11)$$

І так само для

$$\frac{\partial N}{\partial \vec{k}} = \vec{e}_x \frac{\partial N}{\partial k_x} + \vec{e}_y \frac{\partial N}{\partial k_y} + \vec{e}_z \frac{\partial N}{\partial k_z} = \text{grad}_k N \quad (1.12)$$

З огляду на те, що $d\vec{r}/dt = \vec{v}; d\vec{k}/dt = \vec{F}/\hbar$ запишемо співвідношення (1.9) у вигляді

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \left(\vec{v} \frac{\partial N}{\partial \vec{r}} \right) + \frac{1}{\hbar} \left(\vec{F} \frac{\partial N}{\partial \vec{k}} \right) = 0 \quad (1.13)$$

З останнього доданку зазвичай виділяють короткодійні сили, що викликають розсіювання носіїв. Його називають інтегралом зіткнень і традиційно записують символічно у правій частині, як показано в (1.14).

Найбільш фундаментальним для дослідження процесів у напівпровідникових матеріалах за субмікронних розмірів компонентів є метод Монте-Карло у застосуванні до розв'язку кінетичного рівняння Больцмана [53].

2.1.2 Наближення часу релаксації

Для моделювання поширено використання наближення часу релаксації, яке істотно спрощує кінетичне рівняння і полегшує знаходження функції розподілу за відомих механізмів розсіювання носіїв та значеннях швидкості процесів. Хоча одержувана при цьому інформація у більшості випадків буває надлишковою, якщо метою є з'ясування лише деяких усереднених величин або їх просторові розподіли. Найбільш важливими характеристиками колективу звичайно є концентрація, потік й енергія частинок. Більш просто й ефективно визначати такі величини чи їхні функції у просторі-часі не за допомогою функції розподілу, а із диференціальних рівнянь для цих величин. Такі рівняння можуть бути отримані безпосередньо з кінетичного рівняння, якщо провести усереднення до його розв'язку. Для цього всі доданки кінетичного рівняння

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial N}{\partial \vec{r}} + \frac{\vec{F}}{\hbar} \cdot \frac{\partial N}{\partial \vec{k}} = \left[\frac{\partial N}{\partial t} \right]_c, \quad (1.14)$$

помножуються на відповідну величину, що осереднюється, й інтегруються у k -просторі по області, що нас цікавить. Після цього отримуємо диференціальні рівняння у частинних похідних для усереднених величин, які залежать

тепер тільки від часу та координат. У літературі [66] такі рівняння зустрічаються у різних формах, які відрізняються використанням тих чи інших припущень (часто досить тонких), зв'язаних в основному з вибором моделі (гідродинамічна, квазігідродинамічна й ін.) колективу частинок. Здебільшого із цієї причини такі рівняння іноді називають *феноменологічними*, а за своїм фізичним змістом вони є рівняннями збереження.

Проведення процедур усереднення правої частини кінетичного рівняння віддає швидкості зміни за рахунок зіткнень відповідно або концентрації – $(dn/dt)_c$, чи сумарного значення хвильового вектора – $(d\vec{k}_\Sigma/dt)_c$. У підсумку отримаємо відповідні рівняння збереження для концентрації

$$dn/dt = (dn/dt)_c, \quad (1.15)$$

середнього значення хвильового вектора

$$d(n\vec{k})/dt - n\vec{F}/\hbar = (d\vec{k}_\Sigma/dt)_c \quad (1.16)$$

і середньої енергії

$$d(nE)/dt - n\vec{F}\vec{v} = (dE_\Sigma/dt)_c \quad (1.17)$$

Передостаннє рівняння, якщо використати рівність $\vec{p} = \hbar\vec{k}$, зазвичай записують у формі рівняння збереження імпульсу

$$d(n\vec{p})/dt - n\vec{F} = (d\vec{p}_\Sigma/dt)_c \quad (1.18)$$

Використовуючи для кінетичного рівняння наближення часу релаксації, праві частини (1.16), (1.18) і (1.17) можна записати у формі

$$\left(\frac{dn}{dt}\right)_c = - \int_{V_k} \frac{(N - N_0)}{\tau} d\vec{k} = - \frac{\Delta n}{\tau_n} \quad (1.19)$$

$$\left(\frac{d\vec{p}_\Sigma}{dt}\right)_c = - \hbar \int_{V_k} \frac{\vec{k}(N - N_0)}{\tau} d\vec{k} = - \frac{n\vec{p}}{\tau_p} \quad (1.20)$$

$$\left(\frac{dE_\Sigma}{dt}\right)_c = - \int_{V_k} \frac{E(N - N_0)}{\tau} d\vec{k} = - \frac{n(E - E_0)}{\tau_E} \quad (1.21)$$

Відповідно у чисельнику правих частин релаксаційних рівнянь стоять відхилення від рівноважних значень концентрації $\Delta n = n - n_0$, середньої енергії $E_0 = 3k_B T / 2$ та середнього імпульсу $\vec{p}_{cp0} = 0$. Величини у знаменниках звуться відповідно часом релаксації концентрації (τ_n), імпульсу (τ_p) та енергії (τ_E).

2.1.3 Особливості розсіювання носіїв

Наведемо співвідношення для розрахунку часів релаксації для головних типів розсіювання носіїв [6], які використовуються у моделюванні. Їх отримано з виразів для відповідних швидкостей розсіювання, які використовуються при моделюванні методом Монте-Карло, шляхом усереднення по гіпотетичній функції розподілу Максвелла–Больцмана з електронною температурою. Цей метод використано у [60] для деяких видів розсіювання.

Домішкове розсіювання є практично пружним і, не змінюючи енергії електронів, не бере участі в міждолинних переходах і релаксації енергії. У той же час, ефективно хаотизуючи рух носіїв, воно вносить істотний (особливо за низьких температур, коли роль фононів невелика) внесок в релаксацію імпульсу, зворотний час якої [70]

$$\frac{1}{\tau_{p \text{ дом}}} = \sqrt{\frac{8\pi}{m^*}} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \right)^2 \left[\ln(1 + \eta) - \frac{\eta}{1 + \eta} \right] N_{\text{дом}} (k_B T_e)^{-3/2} \quad (1.22)$$

Тут $N_{\text{дом}}$ – концентрація домішки, m^* – ефективна маса густини станів для відповідної долини, T_e – електронна температура, k_B – стала Больцмана, а параметр η для моделі Брукса-Херрінга визначається радіусом екранування r_e

$$\eta = (2kr_e)^2 = 12\epsilon\epsilon_0 m^* (k_B T_e)^2 / \hbar e^2 N_{\text{дом}} \quad (1.23)$$

При використанні моделі без враховує екранування домішкового центра носіями (Конуелл-Вайскопфа), значення η задається виразом

$$\eta = 6\pi\epsilon\epsilon_0 k_B T_e / e^2 N_{\text{дом}}^{1/3} \quad (1.24)$$

а в (1.22) опускається другий доданок у квадратних дужках.

Для **акустичного розсіювання** спостерігається лінійна залежність швидкості розсіювання від температури кристалічної решітки T , а зворотний час релаксації імпульсу можна знайти із співвідношення [70]

$$\frac{1}{\tau_{\text{пак}}} = \frac{\sqrt{3} m^{*3/2} D_a^2}{\pi \hbar^4 \rho v_{\text{зв}}^2} k_B T \sqrt{k_B T_e} \quad (1.25)$$

Тут D_a – константа акустичного деформаційного потенціалу, ρ – густина речовини, $v_{\text{зв}}$ – швидкість звуку.

В акустичному розсіянні беруть участь найменш енергійні акустичні фони, тому часто його вважають практично пружним, що не викликає релаксації енергії. Однак за необхідності ступінь пружності зіткнень можна визначити з співвідношення

$$\frac{\tau_p}{\tau_E} = \frac{4m^* v_{\text{зв}}^2}{k_B T} \quad (1.26)$$

яке може служити для визначення часу релаксації енергії τ_E при акустичному розсіянні.

Час релаксації імпульсу для **полярного оптичного розсіювання** може бути визначено за формулою

$$\frac{1}{\tau_{\text{по}}} = \alpha \omega_0 \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot \frac{\text{ch}(t - t_e)}{\text{sh} t} t_e^{1/2} K_0(t_e) \quad (1.27)$$

де α - так звана полярна оптична стала

$$\alpha = \frac{e^2 \sqrt{m^*}}{4\sqrt{2} \pi \epsilon_0 \hbar (\hbar \omega_0)^{1/2}} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_{\text{ст}}} \right) \quad (1.28)$$

$\hbar \omega_0$ – середня енергія оптичних фонових, ϵ_∞ і $\epsilon_{\text{ст}}$ – відповідно значення високочастотної і статичної діелектричної проникності, $t \equiv \hbar \omega_0 / 2k_B T$,

$t_e \equiv \hbar\omega_0 / 2k_B T_e$, а $K_0(t_e)$ – модифікована функція Бесселя другого роду нульового порядку.

Міждолинне розсіювання також є суттєво непружним, оскільки в кожному акті розсіювання поглинається або збуджується міждолинний фонон з енергією, близькою до енергії оптичних фононів. При переході електрона з i -долини в нееквівалентну j -долину

$$\frac{1}{\tau_{nij}} = \frac{1}{\tau_{pij}} = \left(\frac{m_j^*}{2\pi} \right)^2 \frac{2Z_j D_{ij}^2}{\rho \hbar^3 \omega_{ij}} \cdot \frac{|\delta_{ij}| e^{-\frac{\delta_{ij}}{2}}}{\text{sh } t} \text{ch}(t - t_e) \sqrt{k_B T_e} K_1(|\delta_{ij}|/2) \quad (1.29)$$

Тут D_{ij} константа міждолинного зв'язку, $\delta_{ij} = \Delta_{ij} / k_B T_e = (E_{cj} - E_{ci}) / k_B T_e$ – нормована відстань від дна j -долини до дна i -долини, іншими словами за переходу електрона з нижньої долини у верхню $\delta_{ij} > 0$. Величини t і t_e визначаються так саме, як і при оптичному розсіянні, але в них треба використовувати енергію міждолинного фонона, K_1 – модифікована функція Бесселя першого порядку, а Z_j – кількість j -долин (враховується, якщо ефективна маса густини станів їх не включає).

Треба мати на увазі, що останній вираз отримано в припущенні $\hbar\omega_{ij} \ll \Delta_{ij}$, яке зазвичай виконується, так як міждолинна відстань для III-нітридів помітно перевищує величину $k_B T_e$.

Розрахунок часу релаксації імпульсу між еквівалентними долинами ($\Delta_{ij} = 0$) проводиться так само, як і для розсіювання на оптичному деформаційному потенціалі [70, 6], з відповідною заміною позначень

$$\frac{1}{\tau_{pii}} = 2 \left(\frac{m^*}{2\pi} \right)^{3/2} \frac{D_{ii}^2}{\rho \hbar^2} \cdot \frac{\text{ch}(t - t_e)}{(k_B T_e)^{1/2} \text{sh } t} \cdot K_1(t_e) \quad (1.30)$$

Тут D_{ii} – константа зв'язку між еквівалентними верхніми (X) долинами, а величини t і t_e визначаються енергією міждолинних фононів.

Для розрахунку *часу релаксації енергії* при оптичному і міждолинному розсіянні можна використовувати, як буде показано далі, відношення (1.55), що характеризує ступінь пружності зіткнень, в яких беруть участь оптичні фонони.

Міждолинне розсіювання, що проявляє себе в сильному електричному полі, не змінюючи загальної концентрації електронів у зоні провідності, призводить до перерозподілу електронів між долинами. Інерційність цього процесу визначається *концентраційним часом релаксації* τ_{nij} , який знаходиться, як і час міждолинної релаксації імпульсу (1.29). Ступінь заселеності долин можна характеризувати коефіцієнтами

$$b_i(T_e) = n_i / n = n_i / (n_i + n_j) = 1 / (1 + n_j / n_i) = 1 / (1 + \tau_{nji} / \tau_{nij}) \quad (1.31)$$

які визначаються через концентраційні часи релаксації або для стаціонарного стану, коли міждолинні переходи взаємно врівноважуються, через відношення концентрацій:

$$\tau_{nij} / \tau_{nji} = n_i / n_j = \left(m_{di}^* / m_{dj}^* \right)^{3/2} \exp(-\Delta_{ij} / k_B T_e) \quad (1.32)$$

Результуючий час релаксації в кожній долині може бути знайдено через підсумовування відповідних зворотних часів для кожного виду розсіювання, а середнє по долинах – таким же чином, але з ваговими коефіцієнтами, рівними заселеностям (1.31).

Необхідно відзначити, що в вирази для часів релаксації входить ефективна маса густини станів. Для розрахунку рухливості $\mu = e\tau_p / m_c^*$ необхідно використовувати омічну ефективну масу.

2.1.4 Особливості для багатодолинних напівпровідників

Для **однодолинної** моделі зони провідності рівняння (1.18) при збереженні сумарної кількості часток у конкретній зоні ($dn / dt = 0$) може бути зафіксо-

вано у формі рівняння збереження для середнього дрейфового значення імпульсу $\vec{p}(\vec{r}, t)$

$$d\vec{p}/dt - \vec{F} = -\vec{p}/\tau_p \quad (1.33)$$

або для дрейфової швидкості

$$d\vec{v}/dt - \vec{F}/m^* = -\vec{v}/\tau_p \quad (1.34)$$

яке має простий фізичний зміст: швидкість спрямованого руху зростає під дією сили електричного поля, так само як і для вільних часток, але зменшується за рахунок розсіювання носіїв, квазі-«сили тертя» – \vec{p}/τ_p . У статичному електричному полі ці сили врівноважуються і

$$\vec{v} = -(e\tau_p/m^*)\vec{\mathcal{E}} = -\mu\vec{\mathcal{E}} \quad (1.35)$$

тобто рухливість обумовлена середнім часом релаксації імпульсу. У відповідності до (1.20) цей час знаходиться через усереднення оберненого часу релаксації $1/\tau = \lambda_\Sigma = \sum_i \lambda_i$, помноженого на хвильовий вектор, за функцією розподілу

$$\frac{\vec{p}}{\tau_p} = \frac{\hbar}{n} \int_{V_k} \vec{k} \lambda_\Sigma N(\vec{k}) d\vec{k} \quad (1.36)$$

Наявність тут результуючої швидкості розсіювання, що включає всі притаманні даному матеріалу механізми, має сенс, що будь-яке розсіювання, пружне чи непружне, зі збудженням або поглинанням фонона, призводить до втрати спрямованого імпульсу у якійсь мірі та хаотизації руху.

Такі самі міркування можна провести у зв'язку з рівнянням збереження енергії. За незмінної загальної кількості частинок у зоні рівняння (1.17) для середньої енергії у наближенні часу релаксації приймає вигляд

$$dE/dt - \vec{F}\vec{v} = -(E - E_0)/\tau_E \quad (1.37)$$

Для розрахунку часу релаксації енергії τ_E можна вжити усереднення за функцією розподілу (1.21) швидкості розсіювання, помноженої на енергію,

$$\frac{E}{\tau_E} = \frac{1}{n} \int_{V_k} E(\vec{k}) \lambda_{\Sigma} N(\vec{k}) d\vec{k} \quad (1.38)$$

причому λ_{Σ} враховує усі механізми розсіювання, окрім пружних.

Слід відзначити деяке протиріччя між виразами (1.20), (1.21) з одного боку та (1.36), (1.38) з іншого. Однак ця різниця незначна за самою суттю наближення часу релаксації, оскільки відхилення від рівноважного стану незначне, а час релаксації τ є сталою величиною.

У **багатодолинних напівпровідниках** електрони цілком фізично займають нижні стани долин та утворюють порівняно відокремлені колективи із своїми характерними параметрами. Тому усереднення кінетичного рівняння можна проводити за об'ємами k -простору обмеженими окремими долинами. У такому разі, якщо навіть загальна кількість електронів у зоні залишається постійною, то так зване міждолинне розсіювання може приводити до перерозподілу електронів поміж долинами і, природньо, до зміни середніх значень енергії та імпульсу у відповідних долинах.

Для дводолинної моделі зонної структури природньо вжити рівняння збереження для концентрації електронів i -долини

$$\frac{dn_i}{dt} = -\frac{n_i}{\tau_{nij}} + \frac{n_j}{\tau_{nji}} \quad (1.39)$$

і аналогічне рівняння для j -долини

$$\frac{dn_j}{dt} = -\frac{n_j}{\tau_{nji}} + \frac{n_i}{\tau_{nij}} \quad (1.40)$$

Ці рівняння являють собою систему рівнянь і природньо, що праві частини обох відрізняються тільки знаком, тому що сумарна кількість часток у зоні залишається незмінною

$$\frac{d(n_i + n_j)}{dt} = 0. \quad (1.41)$$

Тут τ_{nij} позначено час міждолинної релаксації концентрації, який усереднено за функцією розподілу тільки по i -долині:

$$1/\tau_{nij} = \int_{V_k} \lambda_{ij} N(k) dV_k / \int_{V_k} N(k) dV_k \quad (1.42)$$

який описує швидкість виходу електронів зі станів i -долини у наслідку між-долинного розсіювання.

Другий доданок у (1.39), що характеризує перехід електронів до i -долини, включає τ_{nji} – концентраційний час міждолинної релаксації електронів з j -долини до i -ї, але тут вже зроблено усереднення за функцією розподілу j -долини відповідно:

$$1/\tau_{nji} = \int_{V_{k'}} \lambda_{ji} N(k') dV_{k'} / \int_{V_{k'}} N(k') dV_{k'} \quad (1.43)$$

Схожі міркування можливо провести так само для рівняння збереження хвильового вектора (імпульсу) і записати

$$d(n_i \vec{p}_i) / dt - n_i \vec{F} = - n_i \vec{p}_i / \tau_{pi} \quad (1.44)$$

де до τ_{pi} необхідно врахувати одночасно внутрішньодолинні і міждолинні переходи

$$1/\tau_{pi} = 1/\tau_{pii} + 1/\tau_{pij} \quad (1.45)$$

Для j -долини рівняння збереження імпульсу аналогічне (1.44) з відповідною заміною індексів:

$$d(n_j \vec{p}_j) / dt - n_j \vec{F} = - n_j \vec{p}_j / \tau_{pj} \quad (1.46)$$

з часом релаксації імпульсу, де знову враховано одночасно як внутрі- та між-долинні переходи (з j -долини до i -у)

$$1/\tau_{pj} = 1/\tau_{pjj} + 1/\tau_{pji} \quad (1.47)$$

Рівняння (1.44) і (1.46) є системою рівнянь, яку треба розв'язувати сумісно з системою (1.39) і (1.40), що характеризує заселеність долин.

Релаксаційні рівняння для енергії можливо подати у різних формах у залежності від особливостей фізичних процесів та обраних припущень. Використовуючи прийнятий метод усереднення кінетичного рівняння для енергії, можна провести перетворення інтегралу зіткнень для енергії та записати рів-

няння збереження енергії у i -долині. Яке за виглядом буде співпадати з (1.17) з правою частиною у формі (1.21) з часом релаксації енергії τ_{Eii} , що враховує тільки внутрішньодолинні механізми розсіювання. У той час як міждолинне розсіювання потребує урахування у правій частині додаткових членів, один з яких $(-n_i E_i / \tau_{Eij})$ характеризує зменшення сумарної енергії електронів у i -долині за одиницю часу під час їх переходу до j -долини і залежний від міждолинного часу релаксації енергії τ_{Eii} , який визначається співвідношенням

$$\tau_{Eii} = \frac{\int_{V_k} \lambda_{ij} E(k) N(k) dV_k}{\int_{V_k} E(k) N(k) dV_k} \quad (1.48)$$

Під час зворотних переходів електрони з j -долини до i -ї привносять енергію, що зручно відобразити доданком $(n_j E_0 / \tau_{Eji})$ у правій частині рівняння балансу енергії, який пропорційний концентрації n_j та рівноважній енергії E_0 , оскільки електрони переходять до i -ї долини безпосередньо у наслідок релаксуючих зіткнень. При цьому час релаксації τ_{Eji} визначається подібно до (1.48), але усереднення проводиться для швидкості розсіювання λ_{ji} по станах вже j -долини.

У наслідку система рівнянь, яка описує релаксацію енергії відповідно у дводолинній моделі, природньо може бути подана у формі:

$$\frac{d(n_i E_i)}{dt} - n_i \vec{v}_i \vec{F} = -\frac{n_i (E_i - E_0)}{\tau_{Ei}} \quad (1.49)$$

$$\frac{d(n_j E_j)}{dt} - n_j \vec{v}_j \vec{F} = -\frac{n_j (E_j - E_0)}{\tau_{Ej}} \quad (1.50)$$

Тут часи релаксації τ_{Ei} і τ_{Ej} включають як внутрішньо-, так і міждолинні механізми розсіювання:

$$\frac{1}{\tau_{Ei}} = \frac{1}{\tau_{Eii}} + \frac{1}{\tau_{Eij}},$$

$$\frac{1}{\tau_{Ej}} = \frac{1}{\tau_{Ejj}} + \frac{1}{\tau_{Eji}} \quad (1.51)$$

Якщо скласти рівняння (1.49) та (1.50), і розділити їх на сумарну концентрацію $n = n_i + n_j$, а також урахувати середні по долинах значення енергії у вигляді $E = (n_i E_i + n_j E_j) / n$, відповідно швидкості дрейфу $\vec{v} = (n_i \vec{v}_i + n_j \vec{v}_j) / n$ і часу релаксації енергії $1 / \tau_E = [n_i (E_i - E_0) / \tau_{Ei} + n_j (E_j - E_0) / \tau_{Ej}] / n$, то можна отримати рівняння збереження енергії електрона, середньої для двох долин,

$$\frac{dE}{dt} - \vec{v} \vec{F} = - \frac{E - E_0}{\tau_E} \quad (1.52)$$

Крім того можна загальний середній час релаксації енергії визначити як

$$\frac{1}{\tau_E} = \frac{n_i / \tau_{Ei} + n_j / \tau_{Ej}}{n}, \quad (1.53)$$

де ваговими коефіцієнтами залишаються тільки концентрації. Така форма цілком узгоджується із наближенням часу релаксації, де час τ може бути знайдений за рівноважною функцією розподілу.

Дводолинне наближення зазвичай використовують для напівпровідників, що мають чітко визначену пріоритетну нижчу долину, характеристики якої в основному визначають властивості напівпровідника у слабкому полі. Усі інші долини, міждолинна відстань до яких велика порівняно із енергією оптичних фононів, можливо розглядати як одну вищу (з деякими усередненими параметрами). Це забезпечує адекватні результати моделювання.

Нам достатньо зупинитися на дводолинному наближенні, оскільки метою вивчення є порівняння напівпровідникових властивостей актуальних Ш-нітридів за однією моделлю.

Принциповим є спосіб визначення часів релаксації. У багатьох роботах час релаксації імпульсу знаходиться із статичних поле-швидкісних характеристик: приймаючи в рівнянні (1.34) $d/dt = 0$ отримуємо $1/\tau_p = e\mathcal{E} / m^* v_{ст}(\mathcal{E})$, де $v_{ст}(\mathcal{E})$ - статична поле-швидкісна характеристика, яка знаходиться зазвичай моделюванням методом Монте-Карло або експериментально. Проте в релаксаційних рівняннях, де змінні є функціями не тільки часу, але й координат, повна похідна $d/dt = \partial/\partial t + \vec{v}\partial/\partial \vec{r}$, тому умова $d/dt = 0$ не відповідає умові статичності, бо не враховує стаціонарні процеси, які можуть відбуватися у просторово-неоднорідних полях. Саме через це в роботі [50] спостерігається суттєва невідповідність результатів використання релаксаційних рівнянь моделюванню Монте-Карло. Крім того цей метод дає «інтегральний» час релаксації, що враховує всі механізми розсіювання і не дає змоги аналізувати окремі види.

2.1.5 Пружність розсіювання

Ще одна особливість стосується метода знаходження часів релаксації енергії, які зазвичай також знаходять із статичної залежності енергії електрона від напруженості електричного поля, яка має бути відомою. Недолік цього способу не тільки в хибах, які відзначались при визначенні часу релаксації імпульсу, але й у тому, що необхідне попереднє знання цієї характеристики, що утруднено для новітніх матеріалів. До того ж, вказана залежність не є характеристикою напівпровідникового матеріалу. Часи релаксації енергії доцільно визначати через часи релаксації імпульсу та такий параметр, як пружність певного виду розсіювання.

Пружність характеризує частку енергії, що характеризує середню частину енергії, яку втрачає електрон за одне зіткнення. У застосуванні до наведеної моделі це співвідношення для фононних видів розсіювання має вигляд

$$\frac{\tau_p}{\tau_E} = \frac{\hbar\omega_\phi}{E - E_0} \frac{\frac{1}{\tau_{p\phi}^+} - \frac{1}{\tau_{p\phi}^-}}{\frac{1}{\tau_{p\phi}^+} + \frac{1}{\tau_{p\phi}^-}} \quad (1.54)$$

Тут $\tau_{p\phi}^+, \tau_{p\phi}^-$ відповідно часи релаксації імпульсу фононів з поглинанням фонона на користь електрона, та збудження фононів за рахунок електрону [41].

Зробивши заміну $t = \hbar\omega_\phi / 2k_B T$ та $t_e = \hbar\omega_\phi / 2k_B T_e$ та використовуючи міркування з [41] про пружність розсіювання отримаємо

$$\frac{\tau_p}{\tau_E} = \frac{4}{3} \frac{t t_e}{t - t_e} \text{th}(t - t_e) \quad (1.55)$$

Окремо доречно зупинитись на найбільш важкому для розуміння випадку пружності міждолинного розсіювання, оскільки енергія електрона змінюється не тільки на енергію фонона, а ще й на відстань між долинами $\pm\Delta_{ij}$. Повна форма співвідношення наведена у Додатку [41]. Але у найбільш поширеному та практично вживаному випадку $\hbar\omega_\phi \ll \Delta_{ij}$ можна використовувати (1.55).

Наведемо ще декілька спрощень, які доречні при типових випадках моделювання:

- «теплі електрони» – $T_e \approx T$, $t_e \approx t$ та $\text{th}(x) \approx x$

$$\frac{\tau_p}{\tau_E} \approx \frac{4t t_e}{3} \quad (1.56)$$

- «гарячі електрони» – $T_e \gg T$, $t_e \ll t$

$$\frac{\tau_p}{\tau_E} \approx \frac{4t_e \text{th}(t)}{3} \quad (1.57)$$

Суттєва особливість використовуваного методу релаксаційних рівнянь пов'язана з тим, що часи релаксації визначаються не енергією фіксованого електрона, як при моделюванні Монте-Карло, а знаходяться як середні значення від швидкостей розсіювання, а усереднення виконується за функцією

розподілу. Згадана функція обирається максвелівською за формою, а її нерівноважність враховується природньо через електронну температуру. Чи іншими словами, часи релаксації визначаються як функції електронної температури, відповідні значення якої (у свою чергу) залежать від ступеня розігрівання електронного колективу електричним полем.

2.1.6 Електронна температура

Для кількісного аналізу процесу розігрівання електронів необхідно за рівняннями балансу повної енергії одночасно з енергії дрейфового руху отримати нове рівняння балансу енергії тільки для хаотичного руху. У рівнянні балансу повної енергії (1.37) доданок $e\vec{v}\vec{\mathcal{E}}$ описує енергію, набуту від електричного поля за одиницю часу, у той час, як доданок $(E - E_0)/\tau_E$ – втрачену у результаті зіткнень у відповідний час. Для цього у рівнянні балансу енергії дрейфового руху помножимо всі складові рівняння (1.34) скалярно на \vec{v} . Отримаємо

$$dE_d / dt - e\vec{v}\vec{\mathcal{E}} = -2E_d / \tau_p \quad (1.58)$$

Де права частина є енергія дрейфу, що втрачається за 1 с, а $\tau_p / 2$ – час її релаксації. Віднімаючи останнє рівняння від (1.37), отримаємо рівняння балансу тільки хаотичної (теплової) енергії, яке й визначає динаміку зміни електронної температури:

$$\frac{dE_T}{dt} = -\frac{E_T - E_0}{\tau_E} - \frac{E_d}{\tau_E} + \frac{2E_d}{\tau_p} = \frac{E_T - E_0}{\tau_E} + \frac{E_d}{\tau_E} \left(\frac{2\tau_E}{\tau_p} - 1 \right) \quad (1.59)$$

Доданок $2E_d / \tau_p$ дорівнює енергії дрейфу, яка за 1 с перетворюється безпосередньо у теплову, а її частина, відповідно рівна E_d / τ_E , за той самий час релаксує і переходить до кристалічної решітки. Результирує збільшення теплової енергії за рахунок дрейфової за 1 с відображено у другому доданку перетвореного виразу (1.59). Відношення $2\tau_E / \tau_p \equiv \gamma$ є характерним параметром ефективності переходу енергії дрейфу у теплову, що визначає ступінь

непружності співударянь відносно напрямленої енергії. Відповідно, розігрівання електронного газу можливе тільки за умови, коли швидкість розсіювання імпульсу більша за швидкість розсіювання енергії, інакше кажучи – коли $\tau_E > \tau_p / 2$. І тільки за рахунок перевищення електронної температури над рівноважною ($E_0 = 3k_B T / 2$), яка дорівнює температурі кристалічної решітки, спостерігається стаціонарний стан, за якого отримана і віддана електронами енергії врівноважують одна одну. Це відбувається, коли електронна температура встановлюється на рівні, який відповідає рівності

$$E_T = E_0 + E_d(\gamma - 1) \quad (1.60)$$

Враховуючи, що у стаціонарному стані за (1.35) швидкість дрейфу $v = e\tau_p \mathcal{E} / m^* = \mu \mathcal{E}$, де $\mu = e\tau_p / m^*$ – рухливість, отримаємо для електронної температури вираз

$$T_e = T + \frac{m^2 \mathcal{E}^2 m^* (\gamma - 1)}{3k_B} \quad (1.61)$$

Тут треба зауважити, що часи релаксації для спостерігаємих механізмів розсіювання залежать від електронної температури досить складно. У літературі, наприклад, [60] відома залежність $T_e(\mathcal{E})$, отримана за спрощення про переважання тільки одного виду розсіювання (частіше усього – акустичного), що не враховує доданка E_d / τ_E у (1.59). Але питома вага різних механізмів суттєво змінюється у процесі розігрівання. Зокрема сильні електричні поля характерні переважанням механізмів за участю оптичних фононів. Природньо, що у загальному випадку отримання залежності $T_e(\mathcal{E})$ у аналітичному вигляді практично неможливе. Значно зручніше знаходити залежність, як обернену до $\mathcal{E}(T_e)$

$$\mathcal{E} = \sqrt{\frac{3k_B(T_e - T)}{m^* \mu^2 (\gamma - 1)}} = \frac{v_T}{\mu} \sqrt{\frac{T_e / T - 1}{\gamma - 1}} \quad (1.62)$$

або з чисельного розв'язку рівняння (1.62), розглядаючи його як трансцендентне. Цей вираз, так звана *поле-температурна характеристика*, дає змогу подавати результати розрахунків у вигляді залежностей від напруженості електричного поля.

2.2 Верифікація моделі

Зрозуміло, що прямого експерименту з безпосереднього вимірювання граничних частот бути не може. Тому скористаємось співставленням результатів моделювання «типових» характеристик з результатами інших авторів для підтвердження перш за все функціональних можливостей моделі, її працездатності та адекватності.

Рис. 13 демонструє придатність моделі для розрахунку дрейфової швидкості (а) та рухливості (б) у сильному електричному полі для **германію**.

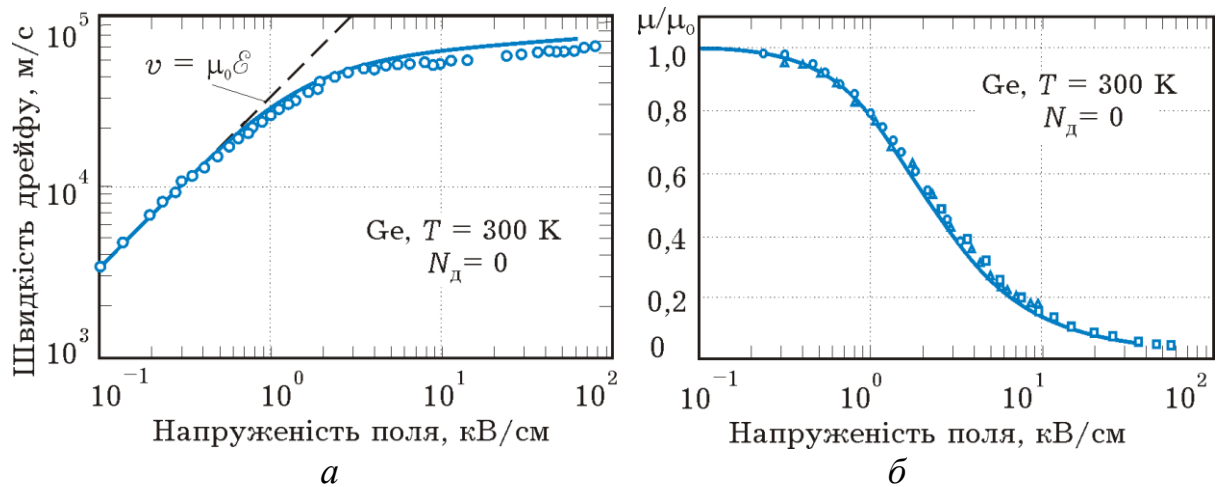


Рис 13. Залежність дрейфової швидкості (а) та нормованих значень дрейфової рухливості (б) у сильному електричному полі для **германію**. Позначки експериментальних даних взято з [74]

Подібні результати отримано в сильному електричному полі і для **кремнію**. Також хороше узгодження отримано для інших типових розрахунків залежності рухливості від температури кристалічної решітки, які для слабого поля наведено на рис. 14. Ліворуч – результати експериментів різних авторів

з умовами вимірювань, взяті з сайту *New Semiconductor Materials. Characteristics and Properties* [45], праворуч – результати наших досліджень.

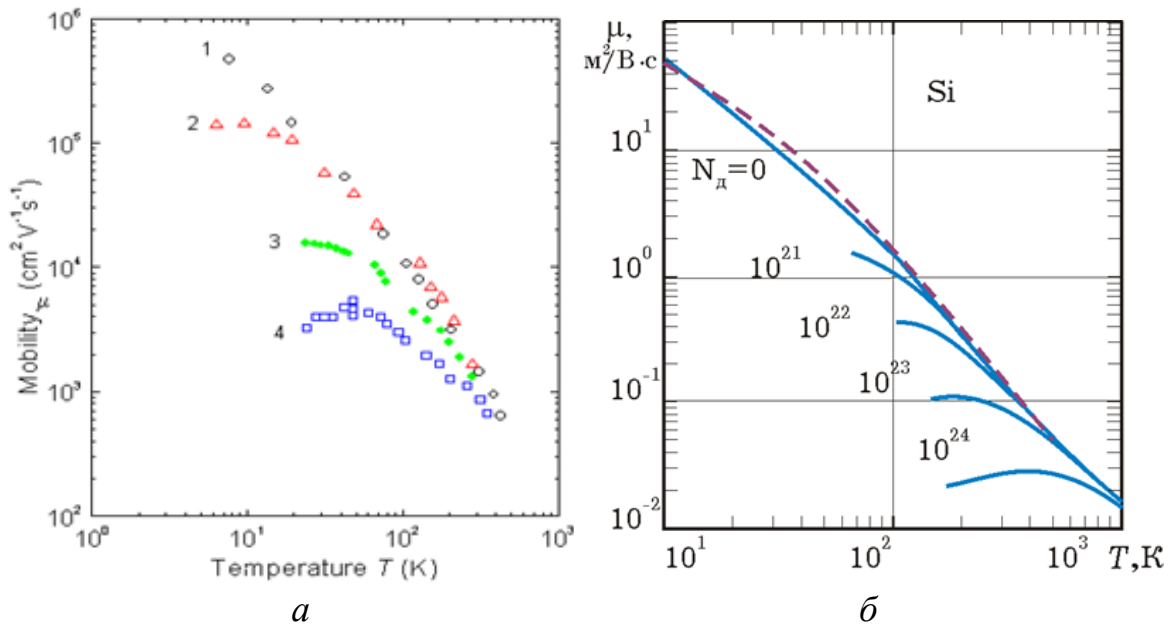


Рис 14. Температурні залежності рухливості електронів у **кремнії**; *a* – експериментальні, отримані різними авторами, *б* – наші розрахунки

Експериментальні результати отримано за наступних умов:

1. High purity Si ($N_d < 10^{-12}$ cm⁻³); time-of-flight technique [71].
2. High purity Si ($N_d < 4 \cdot 10^{-13}$ cm⁻³); photo-Hall effect [72].
3. $N_d = 1.75 \cdot 10^{16}$ cm⁻³; $N_a = 1.48 \cdot 10^{15}$ cm⁻³; Hall effect [73].
4. $N_d = 1.3 \cdot 10^{17}$ cm⁻³; $N_a = 2.2 \cdot 10^{15}$ cm⁻³; Hall effect [73].

Працездатність і адекватність моделі перевірена і для найпоширенішої сполуки A^{III}B^V **арсеніду галію** (рис. 15).

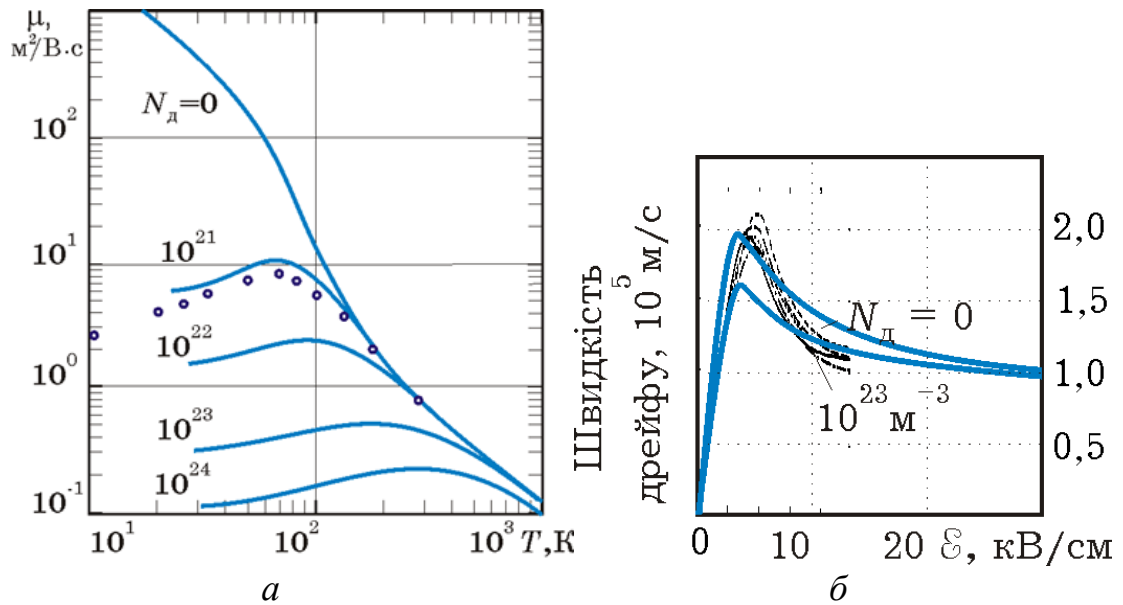


Рис 15. Температурні залежності рухливості (а) для **арсеніду галію**; результати експерименту взято з [75]. Поле-температурні характеристики (б); штрихові лінії – результати моделювання різних авторів, взяті з [76]

У ранніх наших роботах проведено багато досліджень властивостей і характеристик **нітриду галію** як з кубічною так і з гексагональною кристалічною решіткою. Приклади деяких результатів наведено на рис. 16 та рис. 17.

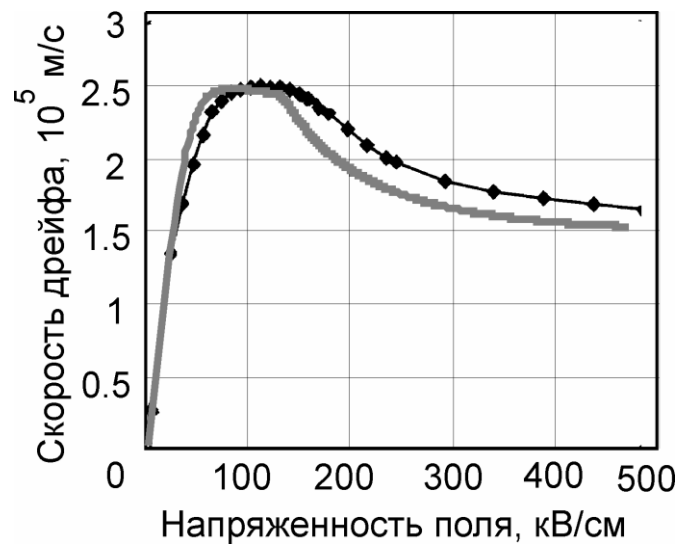


Рис 16. Поле-швидкісна характеристика **нітриду галію** з кубічною кристалічною решіткою. Крива з позначками отримана моделюванням методом Монте-Карло в роботі [77]

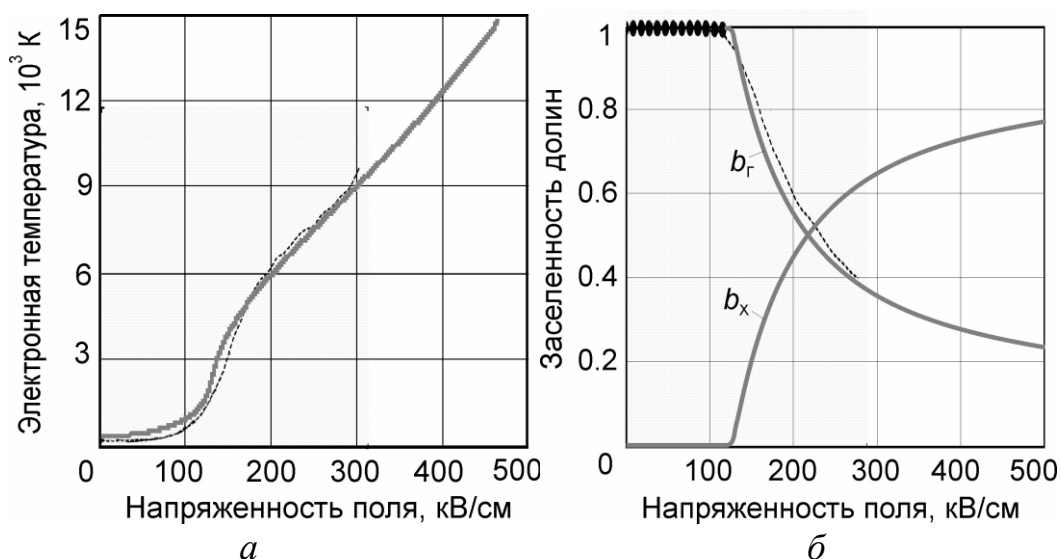


Рис 17. Залежності електронної температури (а) та заселеності долин (б) від напруженості електричного поля для **нітриду галію** з гексагональною кристалічною решіткою. Штрихові лінії реконструйовано для $T = 300$ К з роботи [78]

Більш складними для моделювання є динамічні характеристики. Спробу можливість моделі перевірялася також на дослідженнях властивостей «сплеску» дрейфової швидкості для **ІІІ-нітридів**.

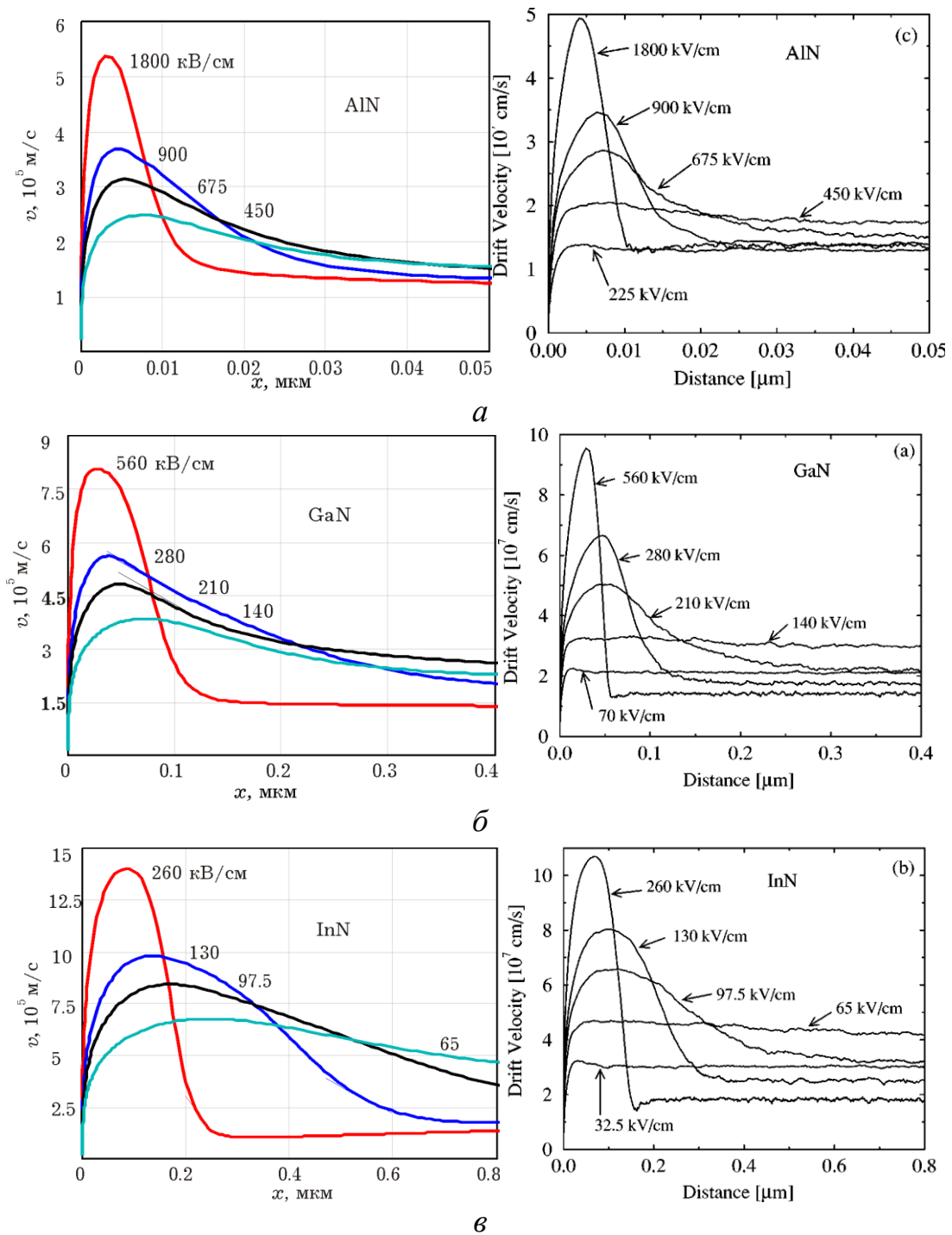


Рис 18. Просторові прояви «сплеску» дрейфової швидкості для **нітриду алюмінію (а), нітриду галію (б) та нітриду індію (в)**. Ліворуч – змодельовані для тих самих значень напруженості електричного поля, що і праворуч, взяті з роботи [57]

Наведене порівняння, як нам здається, з хорошою надійністю дозволяє стверджувати про адекватність використовуваної моделі для дослідження динамічних властивостей напівпровідників у сильних електричних полях. Варто зауважити, що при верифікації перш за все ми звертали увагу на функціональні можливості моделі. Кількісні розбіжності є менш суттєвими, вони одного порядку з невизначеністю вхідних даних з різних довідникових джерел.

2.3 Результати та висновки до розділу 2

- Враховуючи фундаментальність та широкі можливості методу кінетичного рівняння, обрано метод релаксаційних рівнянь, які є результатом усереднення кінетичного рівняння. Ці рівняння мають подібний набір вхідних параметрів і відповідно мають близькі можливості щодо досліджень фізичних процесів. У той же час вони не потребують досить громіздких процедур статистичного усереднення результатів моделювання, які використовуються у багаточастковому методі Монте-Карло.

- На відміну від існуючих подібних моделей тут для знаходження часів релаксації використовуються аналітичні співвідношення, отримані усередненням швидкостей розсіювання для кожного виду, характерні для методу частинок розв'язку кінетичного рівняння. Зокрема виведено вирази для розрахунку міждолинних видів розсіювання, як між еквівалентними, так і нееквівалентними долинами.

- Друга принципова відмінність від подібних моделей полягає в тому, що часи релаксації залежать не від енергії окремих частинок, а від середньої енергії колективу тобто від його електронної температури. Відповідно замість рівняння релаксації енергії отримано і використано рівняння, яке описує процес релаксації електронної температури.

- Для багатодолинних напівпровідників модель має включати як систему рівняння для кожної долини зі своїми параметрами. У такому вигляді вона може враховувати міждолинні переходи і стає придатною для моделювання процесів переносу гарячих носіїв у сильних електричних полях.

Розділ

3. АНАЛІЗ ІМПУЛЬСНИХ ТА ВИСОКОЧАСТОТНИХ ХАРАКТЕРИСТИК Ш-НІТРИДІВ

3.1 Імпульсні властивості.

Дрейфові процеси демонструють цікаві особливості в імпульсному електричному полі. За умови різкого збільшення напруженості поля значення швидкості дрейфу носіїв може в кілька разів перевищувати стаціонарне. Це фізичне явище, відоме як «сплеск» (overshoot) дрейфової швидкості [59, 9, 4], пов'язане з інерційністю процесів розсіювання одночасно з залежністю часів релаксації від напруженості електричного поля. Із увімкненням поля з напруженістю \mathcal{E} прискорення визначається як для вакууму відношенням $e\mathcal{E} / m^*$, а швидкість зростає за законом $v(t) = (e / m^*) \mathcal{E} t$, і за час τ_p вона досягла б значення $\mu \mathcal{E}$. Іншими словами, в процесі зростання швидкість прагне до значення, що обумовлене поки що високою рухливістю в слабкому полі і вже великою напруженістю \mathcal{E} .

Але цього значення швидкість досягти не встигає, тому що одночасно із зростанням швидкості носіїв відбувається подальше розігрівання електронного газу. При цьому переважають майже пружне акустичне та, частково, полярне оптичне розсіювання. Інерційність подібного процесу визначається не стільки процесами релаксації енергії, як цього можна було б очікувати, але інтенсивною хаотизацією спрямованого руху та характерним розігріванням електронів майже без релаксації енергії. Аналіз такої поведінки електронів можна в цілому провести на основі релаксаційних рівнянь, що використовують усереднені часи релаксації.

Аналогічні процеси відбуваються і в статичному, але просторово неоднорідному електричному полі. Це легко зрозуміти, враховуючи, що в узагальненому розумінні рівняння збереження містять саме повну похідну за часом від функцій координат і часу – $d / dt = \partial / \partial t + \vec{v} \partial / \partial \vec{r}$. У змінному за часом,

але однорідному у просторі полі $\partial / \partial \vec{r} = 0$ одночасно з $d / dt = \partial / \partial t$, а в статичному, але просторово змінному полі $d / dt = \vec{v} \partial / \partial \vec{r}$. Тому рівняння, як і їх розв'язки, матимуть подібний вигляд, якщо використати просту заміну

$$x = \int_{t_0}^t v(t') dt'.$$

Після вльоту електрона в простір сильного поля спостерігається так званий *балістичний* рух, тобто рух без розсіювання, подібний до руху у вакуумі. Він триває близько τ_p , за цей час електрон встигає пролетіти відстань порядку довжини вільного пробігу і прискоритися до значень швидкості, більших за швидкість насичення. Після цього, як і в динамічному випадку, у результаті початку зіткнень підвищується електронна температура. Це призводить до переходів електронів у верхні більш енергетичні долини і відповідним зменшенням часу релаксації майже на порядок. Потім швидкість релаксує до значення, що природньо визначається низьким значенням рухливості носіїв у сильному електричному полі.

Ефект «сплеску» можна спостерігати також у тому випадку, коли напруженість поля змінюється в просторі не стрибкоподібно, а відносно плавно. Він помітний на відстанях порядку 0,1 мкм, тому у субмікронних приладах середню швидкість прольоту можна отримати істотно вищою за стаціонарну. Це спостерігається в каналах польових транзисторів з довжиною затвору, меншою за 0,5 мкм. Природньо, що ефект можна застосовувати для отримання надкоротких імпульсів.

Освоєння нових напівпровідникових матеріалів, таких як III-нітриди, що відрізняються більшою шириною забороненої зони і відповідно великими міждолинними відстанями, вимагає, особливо для високочастотних і імпульсних застосувань, ґрунтовнішого аналізу релаксаційних параметрів [46].

Основні релаксаційні параметри електронного колективу напівпровідників, а значить і їх кінетичні і динамічні параметри, такі як рухливість, реакцію на імпульсні і високочастотні поля і тому подібне, моделюються в основному чисельним методом Монте-Карло, що має інформаційну надмірність і

не дозволяє отримувати аналітичні співвідношення. Це відноситься і до такого динамічного явища як «сплеск» швидкості дрейфу. Спробу застосувати [50] для його моделювання релаксаційні рівняння не можна визнати повністю успішною. На наш погляд причина цього полягає в некоректному використанні цих рівнянь.

Звичайна форма релаксаційних рівнянь для імпульсу і енергії, отримувана усереднюваннями кінетичного рівняння Больцмана, має вигляд (1.33) та (1.37). Зазначимо, що для багатодолинних напівпровідників наведені рівняння необхідно вирішувати для кожної долини, а результати усереднювати з урахуванням розподілу електронів по долинах.

Енергія дрейфового руху визначається рівнянням балансу імпульсу (1.33), з якого множенням на дрейфову швидкість легко отримати рівняння балансу для енергії дрейфу (1.58).

Віднімаючи (1.58) з (1.33), отримаємо рівняння балансу теплової енергії (1.59), яке описує міру розігрівання електронів. Для електронної температури, що є мірою енергії хаотичного руху $E_T = 3k_B T_e / 2$, рівняння (1.37) з урахуванням того, що швидкість дрейфу $v = \mu^{\mathcal{E}} = (e\tau_p / m_c^*)^{\mathcal{E}}$, набуває вигляду

$$\frac{dT_e}{dt} = -\frac{T_e - T}{\tau_E} + \frac{m^* \mu^2 \mathcal{E}^2}{3k_B \tau_E} (\gamma - 1) \quad (1.63)$$

У статичному полі рівняння (1.63) перетворюється на рівність

$$\frac{T_e}{T} - 1 = \frac{m^* \mu^2 \mathcal{E}^2}{3k_B T} (\gamma - 1) \quad (1.64)$$

яке і визначає поле-температурну характеристику, тобто зв'язок електронної температури і напруженості електричного поля. Обчислення температури як функції напруженості в явному вигляді ускладнено через складну залежність часів релаксації імпульсу і енергії від електронної температури.

Тут потрібно зауважити, що зворотні часи релаксації в кожній долині знаходяться підсумовуванням зворотних часів для різних механізмів розсія-

ня. Середні по долинах рухливість і омічна ефективна маса визначаються для дводолинної моделі із співвідношень

$$\mu = b_i \mu_i + b_j \mu_j \quad (1.65)$$

$$1/m^* = b_i / m_i^* + b_j / m_j^* \quad (1.66)$$

де $b_i \equiv n_i / (n_i + n_j)$, $b_j = 1 - b_i$ - нормовані концентрації (заселеності долин).

Для їх знаходження необхідно використовувати рівняння (1.39) і (1.40).

Середній по долинах час релаксації імпульсу знаходиться, як завжди, з поле-швидкісної характеристики, або з результуючої рухливості

$$\tau_p = \mu m^* / e \quad (1.67)$$

а середній час релаксації енергії, на відміну від [50], з поле-температурної характеристики

$$\tau_E = \tau_p / 2 + 3k_B (T_e - T) / 2e\mu\mathcal{E}^2 \quad (1.68)$$

Описані рівняння використовувалися для моделювання ефекту «сплеску» в нітридах алюмінію, галію і індію гексагональної та кубічної модифікацій, початкові параметри яких, окрім енергії фононів, обиралися такими ж, як і в [50]. Метою дослідження є вплив балістичних ефектів як на імпульсні властивості провідності (висота та довжина імпульсу швидкості дрейфу), так і просторовий розподіл швидкості. Для стрибкоподібного в часі електричного поля, що змінюється від нульового до фіксованого значення, розраховувалися часові залежності швидкості, електронної температури, часів релаксації, заселеності долин. Часова залежність швидкості перераховувалася в просторі інтегруванням

$$x = \int_0^t v(t) dt \quad (1.69)$$

3.2 Високочастотна провідність

Для високочастотних змін електричного поля обмежимося розрахунком так званої малосигнальної провідності. Для цього всі змінні величини $a(t)$ подамо у вигляді суми постійної складової a_0 і малої гармонічно мінливої в часі з амплітудою a_{\sim} : $a(t) = a_0 + a_{\sim}e^{i\omega t}$. Нехтуючи членами другого порядку малості і враховуючи, що $\partial/\partial t = i\omega$, потрібні рівняння поділимо на незалежні від часу для постійних складових та *лінійні* рівняння для амплітуд змінних.

Використання такої процедури для густини струму $j = env$ дозволяє одержати для обчислення його високочастотної складової таке співвідношення

$$j_{\sim} = en_0 v_{\sim} + en_{\sim} v_0 \quad (1.70)$$

Звідси видно, що змінна складова струму визначаються двома факторами: змінною швидкістю та змінною концентрацією електронів за рахунок міждолинних переходів. Відповідно високочастотна провідність для кожної долини включає два доданки. Обчислюючи v_{\sim} та n_{\sim} як пропорційні змінній амплітуді електричного поля \mathcal{E}_{\sim} , матимемо два характерних доданки для провідності.

Детальні розрахунки і перетворення (1.70) наведено у [70]. Тут наведемо головні етапи.

$$i\omega v_{\sim} = \left(\frac{e}{m^*}\right) \mathcal{E}_{\sim} - \left(\frac{1}{\tau_{p0}}\right) v_{\sim} - v_0 \left(\frac{1}{\tau_p}\right)_{\sim} \quad (1.71)$$

звідки

$$v_{\sim} = \left(\frac{e}{m^*}\right) \tau_{p\omega} \mathcal{E}_{\sim} - v_0 \tau_{p\omega} \left(\frac{1}{\tau_p}\right)_{\sim} \quad (1.72)$$

де зроблено заміну

$$\tau_{p\omega} = \frac{\tau_{p0}}{1 + i\omega\tau_{p0}} \quad (1.73)$$

Величину $(\tau_p^{-1})_{\sim}$ можна знайти з функції $(\tau_p^{-1})(T_e(\mathcal{E}))$ з урахуванням її неявної пов'язаності з напруженістю поля за умови малого сигналу наступним чином:

$$\tau_{p\sim}^{-1} = \frac{d(\tau_p^{-1})}{dT_e} T_{e\sim} \quad (1.74)$$

Тоді внесок першого доданка з (1.70) у динамічну провідність матиме вигляд

$$\sigma_{\omega}^{(1)} = \frac{e^2 n_0 \tau_{p\omega}}{m^*} \left[1 - \frac{m^* v_0}{e} \frac{d(\tau_p^{-1})}{dT_e} T_{e\sim} \right] \quad (1.75)$$

Похідну тут можливо замінити відношенням τ_{p0}^{-1}/T_e . Високочастотна складова температури $T_{e\sim}$ характеризується інерційністю процесів релаксації енергії. Визначення практично можливе з нестационарного рівняння балансу енергії (1.37). Якщо урахувати, що із насиченням швидкості тепловий хаотичний рух переважає над дрейфовим ($\gamma = E_T/E_D \gg 1$) чи, інакше, час релаксації енергії практично не залежить від електронної температури $\tau_E \approx \text{const}(T_e)$, то малосигнальна частина рівняння балансу енергії набуде вигляду

$$i\omega E_{T\sim} = ev_n \mathcal{E}_{\sim} - \frac{E_{T\sim}}{\tau_{E0}} \quad (1.76)$$

чи відносно електронної температури

$$T_{e\sim} = \left(\frac{2ev_n \tau_{E\omega}}{3k_B} \right) \mathcal{E}_{\sim} \quad (1.77)$$

якщо зробити заміну $\tau_{E\omega} = \frac{\tau_{E0}}{1 + i\omega \tau_{E0}}$.

Для першого доданку (1.70) відповідно до результату (1.75) можна подати в такому вигляді:

$$\sigma_{\omega}^{(1)} = \frac{\sigma_0}{1 + i\omega\tau_{p0}} \left[1 - \frac{v_0}{v_n} \cdot \frac{1}{1 + i\omega\tau_{E0}} \right] \quad (1.78)$$

Якщо вважати, що значення провідності визначається переважно електронами однієї долини, то (1.78) при $\omega \rightarrow 0$ збігається з формулою, що описує низькочастотну диференціальну провідність [8, 74, 2].

Другий доданок, що визначається змінною складовою концентрації електронів n_{\sim} , як доповнення до (1.78) знаходять з рівнянь балансу для концентрацій електронів у долинах (1.39) та (1.40). Записуючи їх для відносних величин $b_i = n_i/n$ (у дводолинному наближенні) і беручи до уваги, що $b_{i\sim} = -b_{i\sim} \equiv b_{\sim}$, одержимо для її малосигнальної частини

$$i\omega b_{\sim} = -b_{\sim} \left(\frac{1}{\tau_{ij0}} + \frac{1}{\tau_{ji0}} \right) - b_{i0} \left(\frac{1}{\tau_{ij}} \right)_{\sim} + b_{j0} \left(\frac{1}{\tau_{ji}} \right)_{\sim} \quad (1.79)$$

Тоді змінну складову заселеності можна подати як

$$b_{\sim} = \frac{b_{i0}b_{j0}}{1 + i\omega\tau_m} \left[\tau_{ij0} \left(\frac{1}{\tau_{ij}} \right)_{\sim} - \tau_{ji0} \left(\frac{1}{\tau_{ji}} \right)_{\sim} \right] \quad (1.80)$$

Тут введено поняття узагальненого часу міждолинної релаксації за допомоги обернених часів релаксації між окремими долинами

$$\tau_m = (1/\tau_{ij0} + 1/\tau_{ji0})^{-1} \quad (1.81)$$

і зроблено заміни $b_{i0} = \tau_m / \tau_{ji0}$ та $b_{j0} = \tau_m / \tau_{ij0}$, які отримано безпосередньо з визначення заселеностей.

Далі, якщо використати співвідношення $b_{j0}/b_{i0} = \tau_{ij0}/\tau_{ji0}$, можна спрости-

ти вираз (1.80) до

$$b_{\sim} = \frac{b_{i0}b_{j0}}{1 + i\omega\tau_m} \frac{(\tau_{ji}/\tau_{ij})_{\sim}}{\tau_{ji0}/\tau_{ij0}} \quad (1.82)$$

Якщо для обчислення відношення часів міждолинної релаксації скористатися відповідним співвідношенням, то одержимо

$$b_{\sim} = -\frac{b_{i0}b_{j0}}{1+i\omega\tau_m} \frac{\Delta_{ji}}{k_B T_e} T_{e\sim} \quad (1.83)$$

Відповідно другий доданок для високочастотної електропровідності

$$\sigma_{\omega}^{(2)} = -\frac{e^2 n_0 \tau_{p0}}{m^*} \cdot \frac{\nu_0}{\nu_n} \cdot \frac{\tau_{E\omega}}{\tau_{E0}} \cdot \frac{b_{i0}b_{j0}}{1+i\omega\tau_m} \cdot \frac{\Delta_{ji}}{k_B T_e} \quad (1.84)$$

У підсумку для однієї (нижньої) долини значення високочастотної електропровідності, що нормували на її статичне значення, можливо визначити за формулою

$$\begin{aligned} \sigma_{\omega i} &= \sigma_{0i} \left[\frac{\tau_{p\omega i}}{\tau_{p0i}} - \frac{\nu_{0i}}{\nu_{ni}} \cdot \frac{\tau_{E\omega i}}{\tau_{E0i}} \left(\frac{\tau_{p\omega i}}{\tau_{p0i}} + \frac{b_{i0}b_{j0}}{1+i\omega\tau_m} \cdot \frac{\Delta_{ji}}{k_B T_e} \right) \right] \equiv \\ &\equiv en_{0i}\mu_{0i}F_i(\omega) \end{aligned} \quad (1.85)$$

Для верхньої долини, нехтуючи можливими спрощеннями (наприклад, щодо відсутності насичення швидкості у верхніх долинах), можна провести подібний аналіз. Відмінність у результатах буде пов'язана тільки з тим, що високочастотні складові заселеності верхньої та нижньої долин відрізняються лише знаком: $b_{i\sim} = -b_{j\sim}$. Тому, змінюючи тільки параметри долин та індекси, отримаємо:

$$\begin{aligned} \sigma_{\omega j} &= \sigma_{0j} \left[\frac{\tau_{p\omega j}}{\tau_{p0j}} - \frac{\nu_{0j}}{\nu_{nj}} \cdot \frac{\tau_{E\omega j}}{\tau_{E0j}} \left(\frac{\tau_{p\omega j}}{\tau_{p0j}} - \frac{b_{i0}b_{j0}}{1+i\omega\tau_m} \cdot \frac{\Delta_{ji}}{k_B T_e} \right) \right] \equiv \\ &\equiv en_{0j}\mu_{0j}F_j(\omega) \end{aligned} \quad (1.86)$$

Результуюча високочастотна провідність, нормована на її статичне значення, може бути знайдена усередненням

$$\frac{\sigma_{\omega}}{\sigma_0} = \frac{b_{0i}\mu_{0i}F_i(\omega) + b_{0j}\mu_{0j}F_j(\omega)}{b_{0i}\mu_{0i} + b_{0j}\mu_{0j}} \quad (1.87)$$

В останніх виразах введені високочастотні часи релаксації енергії $t_{E\omega} = t_{E0} / (1+i\omega t_{E0})$ та імпульсу $t_{p\omega} = t_{p0} / (1+i\omega t_{p0})$. Саме вони, одночасно з часом міждолинної релаксації, обумовлюють комплексний характер провідності, який спостерігається на високих частотах.

3.3. Оцінювання граничних частот Ш-нітридів

3.3.1 Гранична частота існування ВДП

У наближенні малого сигналу у попередньому розділі отримано вирази для високочастотної електропровідності електронів i -долини (1.85) та j -долини (1.86)

Тут введено поняття загального часу міждолинної релаксації τ_m через обернені часи релаксації між окремими долинами (1.81)

Результуюча високочастотна провідність, нормована на її статичне значення, може бути знайдена усередненням (1.87).

За потреби використання тридолинної моделі зонної структури, можливо проводити усереднення по усіх долинах

$$\frac{\sigma_\omega}{\sigma_0} = \frac{\sum_{i=\Gamma,L,X} b_{0i} \mu_{0i} F_i(\omega)}{\sum_{i=\Gamma,L,X} b_{0i} \mu_{0i}} \quad (1.88)$$

Функції $F_i(\omega)$ у такому випадку повинні включати доданки, які враховують міждолинні переходи іще в одну долину.

В наведених виразах використано високочастотні часи релаксації енергії $\tau_{E\omega} = \tau_{E0} / (1 + i\omega\tau_{E0})$ та імпульсу $\tau_{p\omega} = \tau_{p0} / (1 + i\omega\tau_{p0})$. Як це було зауважено раніше, вони визначають комплексний характер провідності, що проявляється на високих частотах. Частотна залежність σ_ω визначається множниками типу $(1 + i\omega\tau)^{-1}$, що включають три часові константи τ_p, τ_E, τ_m .

Деякі припущення можуть значно спростити подальший аналіз:

- 1) доцільно обрати пріоритетну долину, що за слабого електричного поля найбільш заселена електронами. Зазвичай, це нижча долину.
- 2) можна обмежитись тільки режимом насичення дрейфової швидкості у цій долині. Саме для такого режиму частотні властивості напівпровідника найбільш показові.

Крім того аналіз спрощується, якщо обмежитись найбільш повільним релаксаційним процесом. знехтувавши інерційністю міждолинних переходів ($\omega\tau_M \ll 1$) та запізнюванням зіткнень ($\omega\tau_p \ll 1$), оскільки з усіх часів релаксації найчастіше найбільше значення має час релаксації енергії τ_E .

За таких припущень з умови $\text{Re}(\sigma_\omega)=0$, яка і відповідає граничній частоті, для якої перестає існувати від'ємна динамічна провідність, можливо одержати

$$\omega_m\tau_{E0} = \sqrt{b_{i0}b_{j0}\Delta_{ji} / k_B T_e} \quad (1.89)$$

Якщо заселеності нижньої та верхньої долин співпадають, а значення від'ємної динамічної провідності найбільше, вираз (3.27) спрощується і межа існування ВДП

$$f_m = \frac{1}{4\pi\tau_{E0}} \sqrt{\frac{\Delta_{ji}}{k_B T_e}} \quad (1.90)$$

визначається тільки відносною міждолинною відстанню та оберненим часом релаксації енергії.

На рис. 19 зображено отримані залежності зникання від'ємної динамічної провідності для III-нітридів GaN, InN та AlN [41]. GaAs та InP наведені для порівняння як класичні, та достатньо досліджені.

Цікавими для аналізу частоти зникнення від'ємної динамічної провідності для III-нітридів вважаємо наступні результати:

- GaN з гексагональною структурою решітки має граничні частоти нижчі за InN з меншою шириною забороненої зони;
- в регіоні електричних полів порядку 200 кВ/см кристали нітриду індію мають порівнянні частоти відсічки незалежно від типу решітки ;
- нітрид алюмінію по всьому діапазону розрахункових сильних електричних полів має максимальні частоти, які перевищують результати інших матеріалів дослідження.

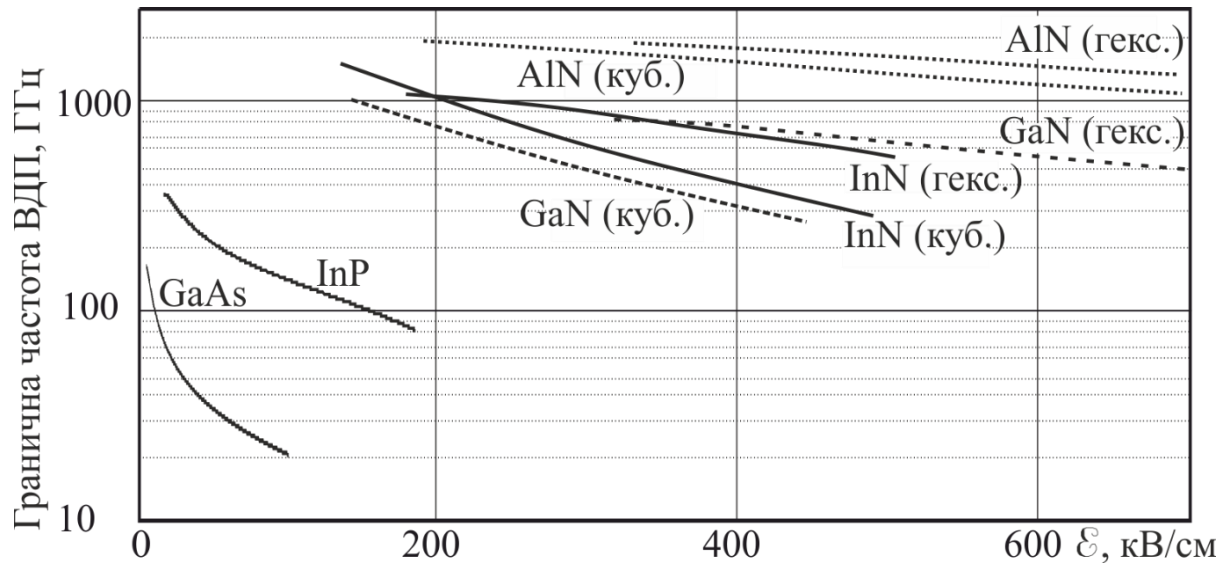


Рис 19. Межа існування від'ємної динамічної провідності для III-нітридів GaN, InN та AlN. Класичні GaAs та InP наведені для порівняння.

Додатково слід проаналізувати як впливають τ_p , τ_E і τ_M на межу існування ВДП.

Із цих трьох часів найбільше значення [56] має τ_E , тому верхня частотна межа ВДП залежить насамперед від інерційності процесів розігрівання та релаксації енергії електронів і становить сотні гігагерц. Час міждолинної релаксації може бути більшим за час релаксації енергії, але тільки в слабкому полі, де міждолинні переходи не спостерігаються.

У слабкому полі (верхні криві на рис. 34 - рис. 37) процеси розігрівання електронного газу і результуючих міждолинних переходів фактично несуттєві, тому спад провідності визначається лише значенням τ_p і відбувається на частотах порядку сотень та тисяч ГГц. Цікаво також відзначити, що III-нітриди кубічної модифікації мають більші значення від'ємної динамічної провідності.

Реактивна провідність виявляється на більш низьких частотах (порядку десятків та сотень ГГц), що пояснюється особливостями множників $(1+i\omega\tau)^{-1} = (1-i\omega\tau) / (1+\omega^2\tau^2)$: реактивна провідність, на відміну від активної, пропорційна першій степені $\omega\tau$. У слабкому полі вона має виключно ін-

дуктивний характер, але в області існування ВДП змінює знак разом з активною складовою і стає ємнісною за характером. Далі, на дуже високих частотах за час періоду поля міждолинні переходи не встигають відбуватися (іншими словами – високочастотна складова заселеності долин b_{\sim} зменшується) і реактивна провідність знову стає індуктивною. Цікаво, що значення провідності визначається параметрами верхніх долин, оскільки більшість електронів знаходиться у цих долинах.

Отримані результати для граничної частоти в цілому відповідають відомим результатам [62], але для нітриду галію суттєво перевищують результати прогнозу, наведені в [75].

3.3.2 Спектральна характеристика відгуку дрейфової провідності

Підтримуючи практичну застосовність наведеного вище підходу [8], ми пропонуємо розглянути додатковий підхід [18].

Зроблені припущення під час оцінки граничної частоти існування ВДП можуть бути не виконаними для деяких напівпровідників, наприклад, з невеликою міждолинною відстанню. Альтернативно частотні властивості напівпровідника можуть бути з'ясовані через реакцію дрейфової швидкості носіїв на імпульсну дію електричного поля. Запропонований підхід базується на вирішенні системи диференціальних рівнянь, яка складена з рівнянь релаксації для збереження енергії, імпульсу та концентрації носіїв відносно часів релаксації для різних типів розсіювання [9]. На відміну від традиційного використання рівняння загального енергетичного балансу, тут використовується рівняння електронної температури, яке отримано завдяки поділу сумарної енергії окремо на дрейфову та хаотичну компоненти.

Запропонований вперше метод базується на аналізі Фур'є-спектру імпульсної реакції швидкості дрейфу носіїв у напівпровідниковому матеріалі, оцінці частотної межі. Додатково можливо порівняння з результатами за межами існування від'ємної динамічної провідності [8]. Строго кажучи, тестовим імпульсом має бути δ -подібний імпульс напруженості електричного поля, але для визначення обраних за ціль дослідження граничних верхніх частот, ситуація природньо спрощується. Якщо врахувати явище сплеску (overshoot) швидкості дрейфу, то найбільш високочастотні компоненти Фур'є перетворення мають місце на передньому фронті перехідного процесу.

Аналіз поведінки електронного колективу в імпульсному електричному полі проведено на основі розв'язку системи релаксаційних рівнянь для імпульсу

$$d(n_i \vec{p}_i)/dt + en_i \vec{\mathcal{E}} = -n_i \vec{p}_i / \tau_p \quad (1.91)$$

що є логічним продовженням (1.44); енергії

$$d(n_i E_i) / dt - e n_i \vec{v}_i \vec{\mathcal{E}} = n_i (E - E_0) / \tau_E \quad (1.92)$$

яке отримано з (1.52), концентрації

$$\frac{dn_i}{dt} = -\frac{n_i}{\tau_{ij}} + \frac{n_j}{\tau_{ji}} \quad (1.93)$$

та електронної температури

$$\frac{dT_e}{dt} = -\frac{T_e - T_0}{\tau_E(T_e)} + \frac{m^* \mu^2(T_e) \mathcal{E}^2}{\tau_E(T_e) 3k_B} \left(\frac{2\tau_E(T_e)}{\tau_p(T_e)} - 1 \right). \quad (1.94)$$

Часи релаксації визначались з аналітичних співвідношень для різних видів розсіювання через електронну температуру з (1.61).

За потреби моделювання імпульсних характеристик і подальше знаходження Фур'є-спектру можливо провести і за допомоги тридолинної моделі.

3.4 Обрання параметрів моделювання

Для вибору найбільш характерних і фізично цікавих значень напруженостей електричного поля проведемо аналіз поле-швидкісних характеристик (рис. 20) у логічному порядку збільшення ширини забороненої зони

Природньо визначати імпульсну характеристику швидкості дрейфу носіїв у досліджуваних матеріалах не для великої кількості різних значень полів, а для найбільш типових і особливих за фізичними процесами в напівпровіднику. Головними є області стрімких змін швидкості дрейфу та моменти початку активації механізмів окремих типів розсіювання, зокрема міждолинного.

У рамках наведених досліджень і об'єму моделювання, ми обмежилися розглядом шести різних значень полів для кожного ІІІ-нітриду, що достатньо для вияву тенденцій, але без надмірного перевантаження відображення результатів та складності розрахунків.

Додатково треба враховувати, що всі розглянуті ІІІ-нітриди мають дві форми за структурою кристалічної решітки, зокрема кубічну (цинкова обманка) та гексагональну (вюрцит). Структура решітки істотно впливає на часто-

тні характеристики. Це потребує окремого моделювання кожного типу кристалів. Зауважимо, що гіпотеза про відмінності максимальних частот різних форм структурної решітки того самого матеріалу була підтверджена далі.

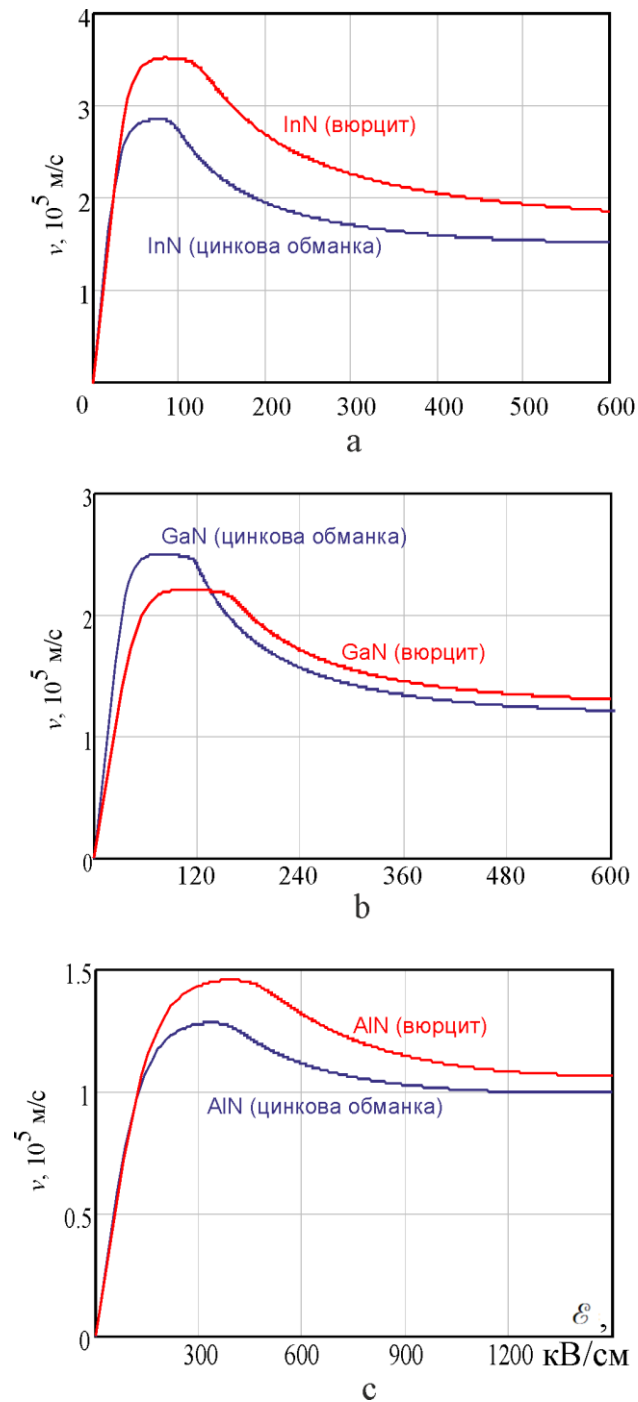


Рис 20. Поле-швидкісні характеристики III-нітрідів InN (a), GaN (b) та AlN (c) з кристалічними структурами типу вюрциту чи цинкової обманки.

Вивчення поле-швидкісних залежностей для нітриду галію та нітриду індію як гексагонального (вюрцит), так і кубічного (цинкова обманка) типу кристалу, дозволяє обрати значення електричного поля 20, 50, 150, 300, 500 і 600 кВ/см.

Втім поле-швидкісна характеристика для AlN переконливо демонструє нам значно більші значення електричного поля, які можна вважати за сильні для цього напівпровідникового матеріалу. Ми зупинилися для моделювання на імпульсних напруженостях електричного поля 150, 300, 500, 600, 1000 і 1500 кВ/см.

Синхронне використання чотирьох ідентичних значень (зокрема 150, 300, 500, 600 кВ/см) дозволяє більш послідовно провести порівняння результатів для усіх розглянутих III-нітридів.

3.5 Результати та висновки до розділу 3.

Таким чином запропонований новий метод оцінки спектральної характеристики відгуку дрейфової провідності демонструє переваги з точки зору складності підрахунків (модельне спрощення у порівнянні з розрахунками за Монте-Карло) та може використовуватися не тільки у граничних станах (ККД знижується до 0 для генерації у режимі ОНОЗ, чи існування ВДП), а за наявності відповіді у поведінці носіїв на зовнішнє електричне поле.

За наявності переваг метод потребує детальних розрахунків.

Розділ

4 РЕЗУЛЬТАТИ МОДЕЛЮВАННЯ**4.1 Моделювання імпульсних властивостей**

Результати розрахунків [7, 9, 62] наведені на рис. 21 – рис. 26 у такій послідовності: реакція на прямокутний та реакція на трапецеїдальні імпульси з різною тривалістю фронту. Також подано просторовий розподіл швидкості, обчислений за (1.69). Значення напруженості поля, для яких проводилось моделювання, обирались такими ж, як і в [50], найбільші значення в 3-5 разів перевищують критичні.

Результати розрахунків, наведені на рис. 21 – рис. 26, показують, що на початковій ділянці електрони під дією сили $e\mathcal{E}$ прискорюються і спостерігається балістичний рух з лінійно зростаючою швидкістю $(e\mathcal{E}/m^*)t$ і пройденою відстанню, що параболічно збільшується. Такий рух продовжується час порядку τ_p для слабкого поля, після чого в результаті розсіювання відбувається релаксація параметрів руху до значень, характерних для дрейфового руху в заданому сильному полі.

Звичайно, що пікові значення «сплеску» зростають зі збільшенням напруженості. За найбільших значень поля вони в 4-8 разів перевищують відповідні стаціонарні значення з поле-швидкісної характеристики. Найбільші абсолютні значення швидкості отримано для нітриду галію – близько $11 \cdot 10^5$ м/с. Пояснити це можна тим, що нітрид галію має найбільший час релаксації імпульсу, а саме цей час триває балістичне зростання швидкості.

Істотно, що пікове значення швидкості зменшується при більш похилому наростанні електричного поля. Особливо це стосується нітриду алюмінію, як кубічної, так і гексагональної модифікації. Для обраних довжин фронту поля ефект «сплеску» практично не спостерігається. В той же час, збільшення

тривалості фронту імпульсу збільшує і довжину «балістичного» пробігу електронів. За певних умов вона може сягати декількох мікрометрів.

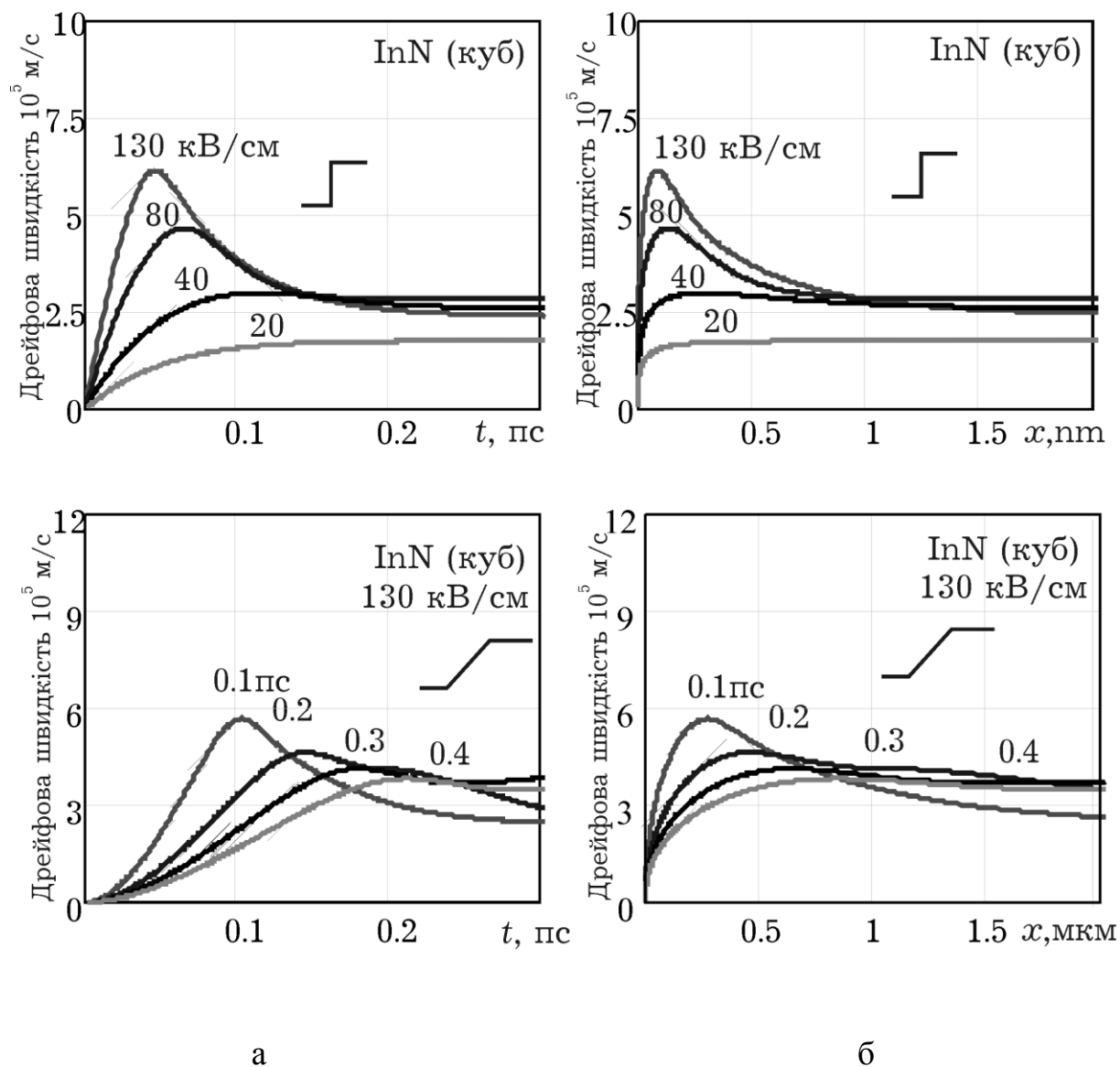


Рис 21. – Результати розрахунків динамічних реакцій на прямокутний з різною амплітудою та трапецеїдальний імпульс з різною тривалістю фронту для кубічного нітриду індію у часі (а). Також представлено просторові прояви ефекту «сплеску» (б)

Особливістю реакції на трапецеїдальний імпульс може бути наявність двох максимумів (рис. 23 – рис. 24) яскраво виражених для нітриду галію при пологому фронті.

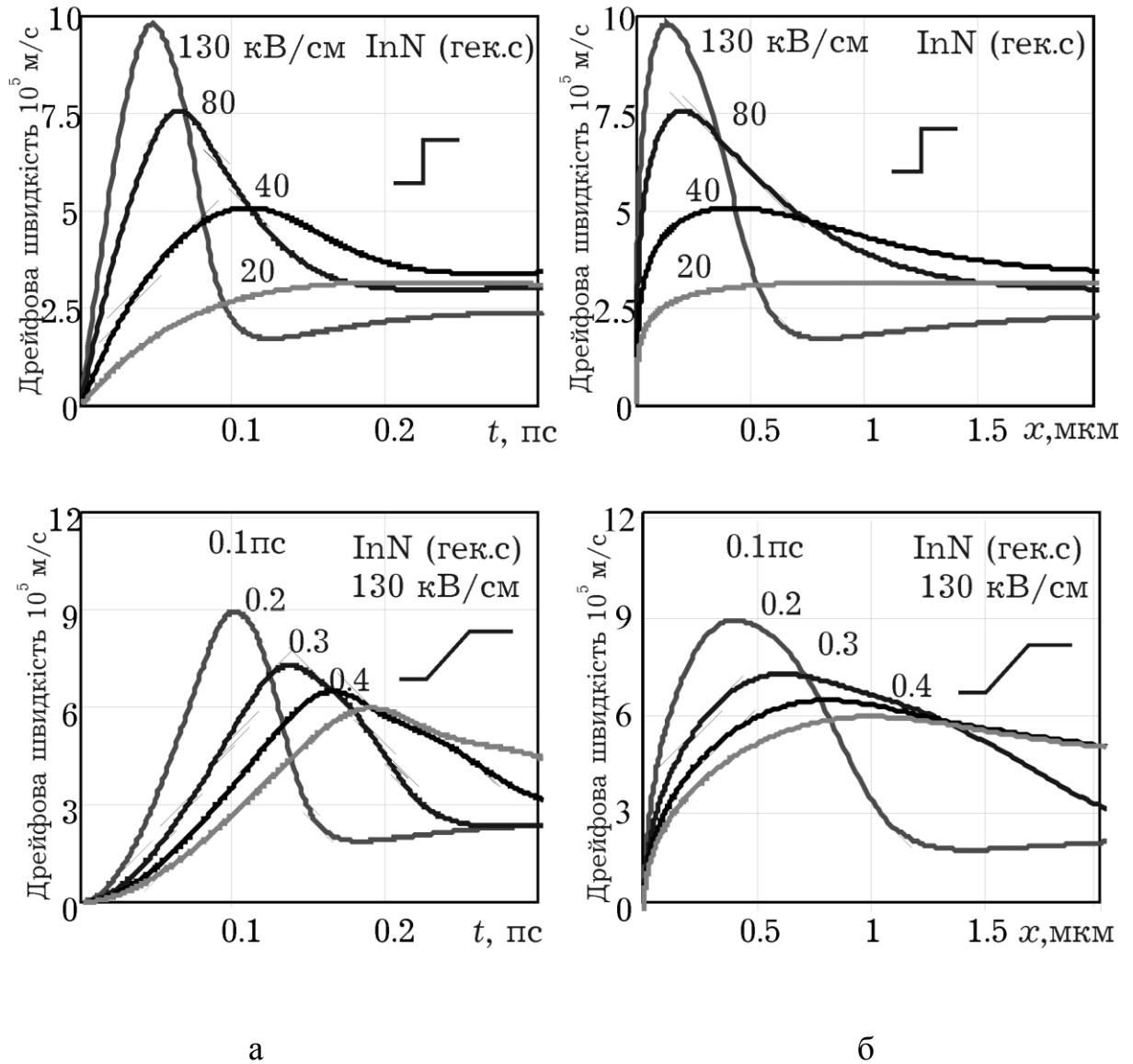


Рис 22. – Результати розрахунків динамічних реакцій на прямокутний з різною амплітудою та трапецеїдальний імпульс з різною тривалістю фронту для гексагонального нітриду індію у часі (а). Також представлено просторові прояви ефекту «сплеску» (б)

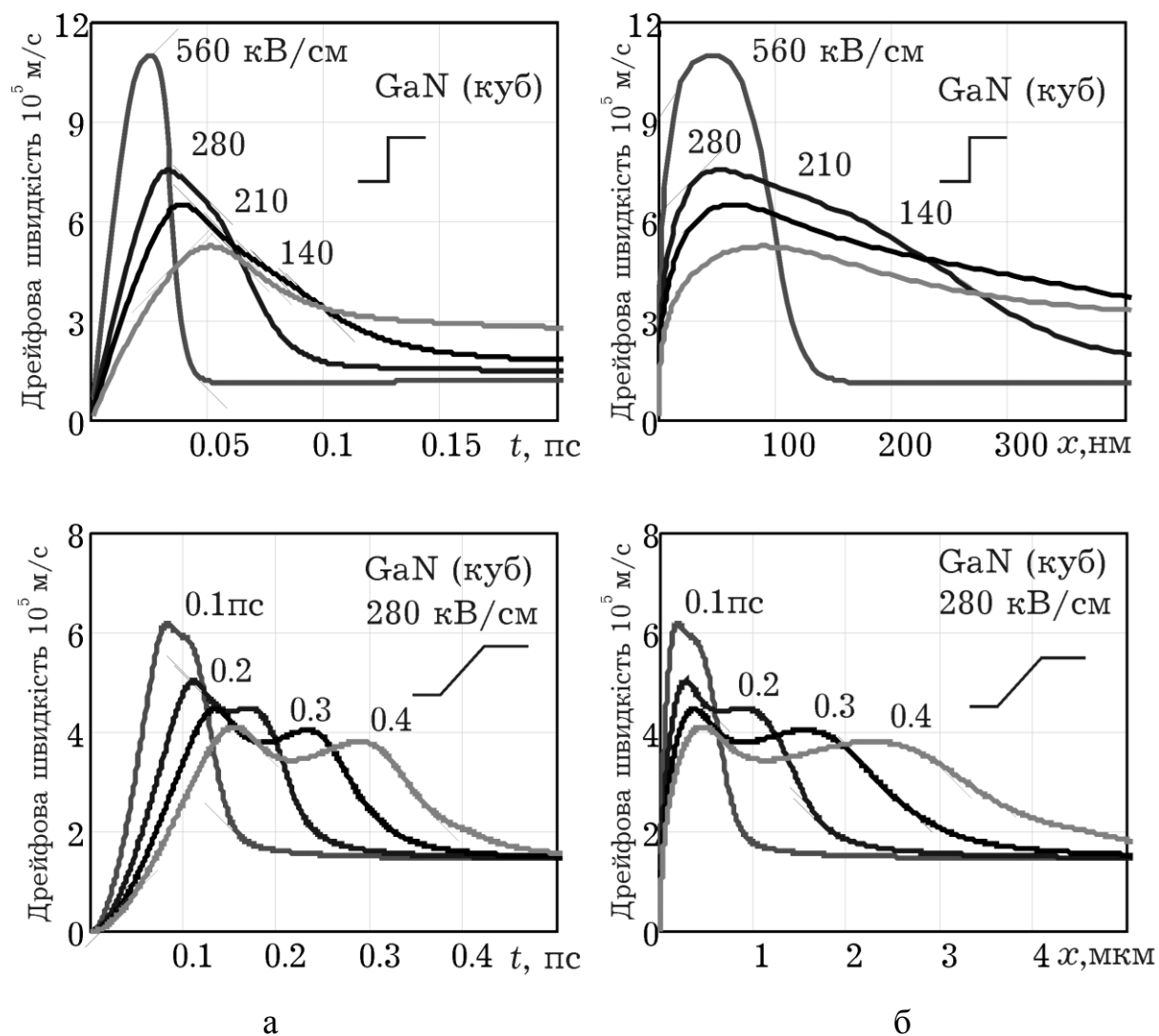


Рис 23. – Результати розрахунків динамічних реакцій на прямокутний з різною амплітудою та трапецеїдальний імпульс з різною тривалістю фронту для кубічного нітриду галію у часі (а). Також представлено просторові прояви ефекту «сплеску» (б)

Фізика першого максимуму описана вище, другий максимум відповідає прояву «сплеску» у верхній долині і пов'язаний з «пізнім» досягненням енергії міждолинних переходів, оскільки напруженість поля збільшується лінійно

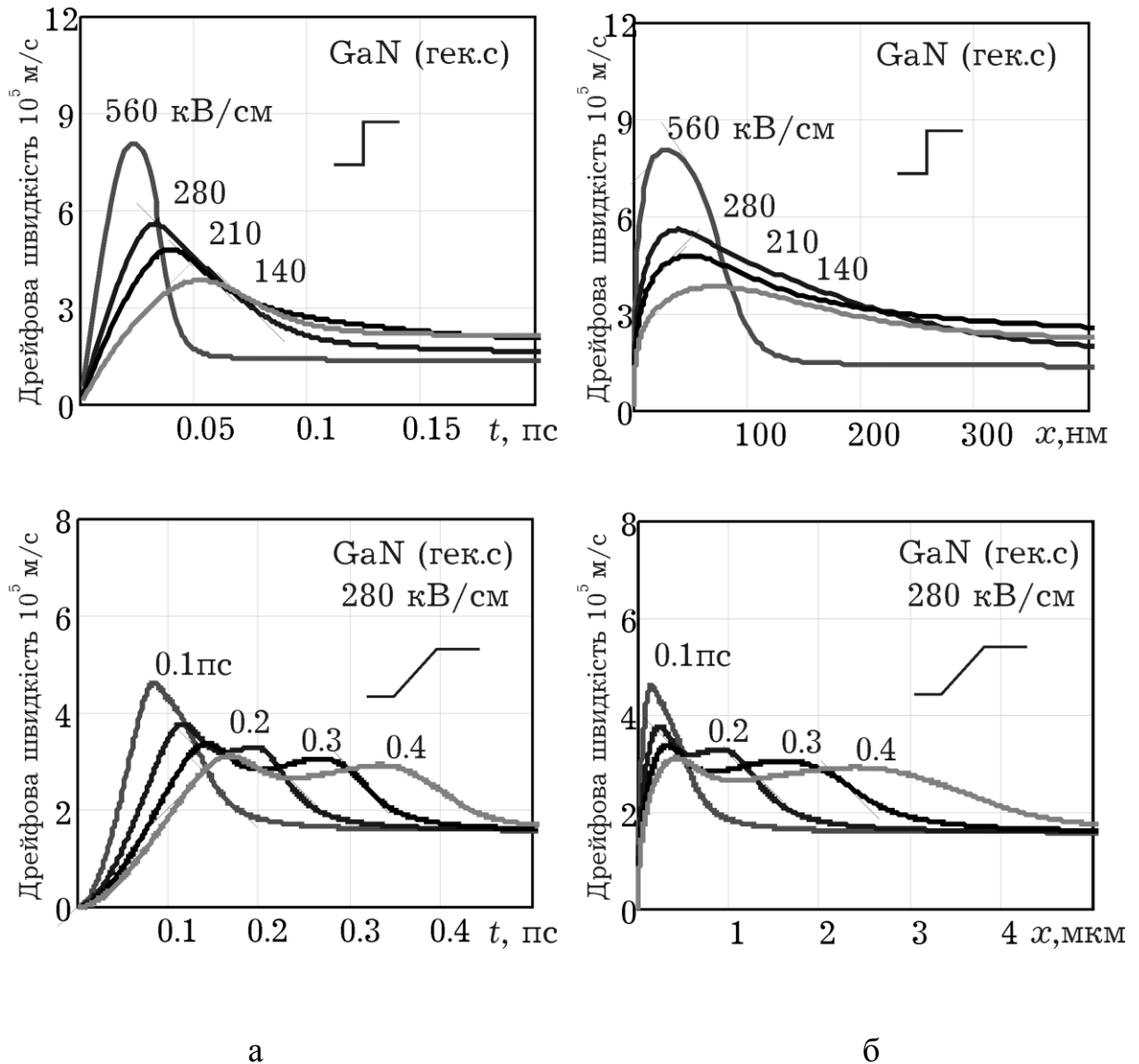


Рис 24. – Результати розрахунків динамічних реакцій на прямокутний з різною амплітудою та трапецеїдальний імпульс з різною тривалістю фронту для гексагонального нітриду галію у часі (а). Також представлено просторові прояви ефекту «сплеску» (б)

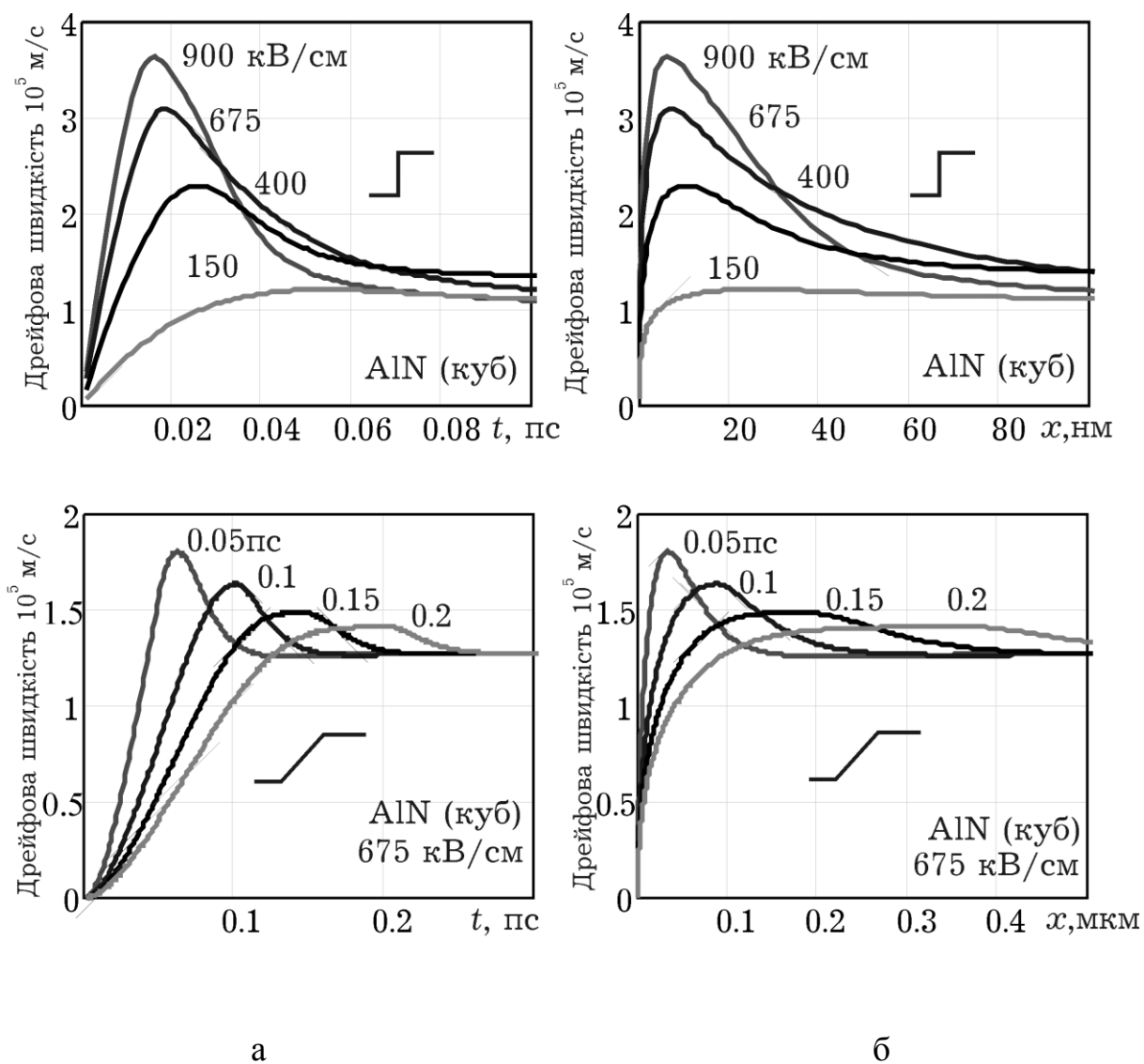


Рис 25. – Результати розрахунків динамічних реакцій на прямокутний з різною амплітудою та трапецеїдальний імпульс з різною тривалістю фронту для кубічного нітриду алюмінію у часі (а). Також представлено просторові прояви ефекту «сплеску» (б)

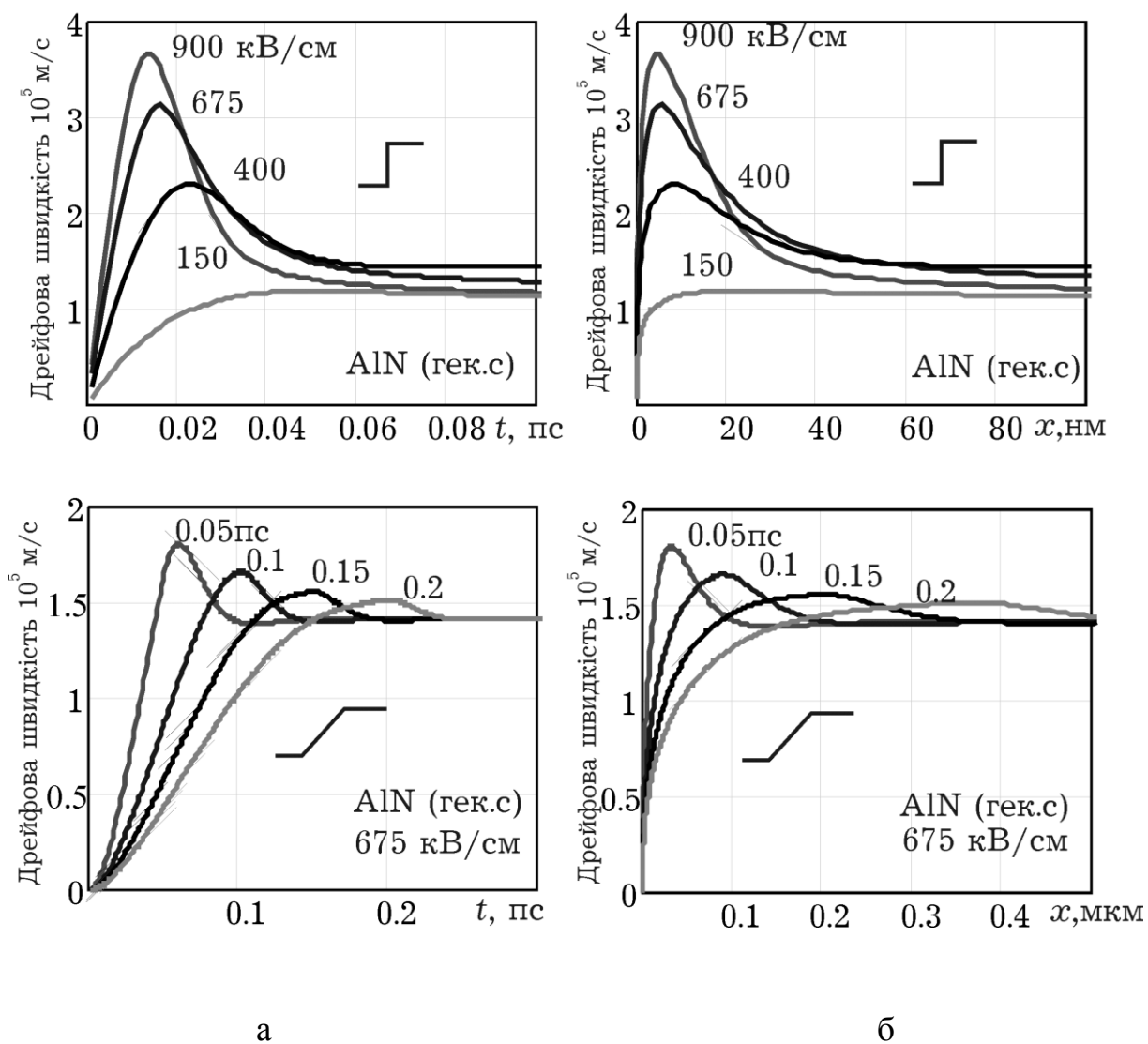


Рис 26. – Результати розрахунків динамічних реакцій на прямокутний з різною амплітудою та трапецеїдальний імпульс з різною тривалістю фронту для гексагонального нітриду алюмінію у часі (а). Також представлено просторові прояви ефекту «сплеску» (б)

4.2 Особливості «сплеску» дрейфової швидкості III-нітридів.

Розглянемо подробиці чотирьох випадків з рис. 21 – рис. 26. Для порівняння наведемо залежності електронної температури, населеності долин та часів релаксації енергії та імпульсу від часу.

Зауважимо, що модель використовувалась для широкого спектру багатодолинних напівпровідників, зокрема GaAs [2 – 4, 14 – 16], а потім і для GaN [5 – 9]. Було перевірено можливість використання методу іншими науковцями [74] та для трьох- і більш компонентних напівпровідників [17] чи специфічних механізмів розігріву носіїв [10]. Це дало можливість перевірити підхід та порівняти з результатами та висновками інших методів та фахівців [63].

Пара рис. 27 – рис. 28 надає можливість порівняти відмінність реакції кубічного та гексагонального нітридів галію при повільному наростанні електричного поля від 0 до 280 кВ/см за 0,4 пс.

Обрання саме цих умов пов'язане з вже згаданим раніше ефектом двох максимумів на поле-швидкісній характеристиці.

Найбільш цікавим ефектом ми вважаємо наявність локального максимуму часу релаксації імпульсу для обох типів кристалічної ґратки. Гексагональний нітрид галію демонструє практично однакову населеність верхньої та нижньої долин за умов моделювання на відміну від кубічного.

Інша пара рис. 29 – рис. 30 надає можливість порівняти відмінність реакції кубічного та гексагонального нітридів алюмінію при значенні електричного поля 900 кВ/см. Саме цей матеріал обрано за перспективністю у отриманні максимальних частот з усіх III-нітридів,

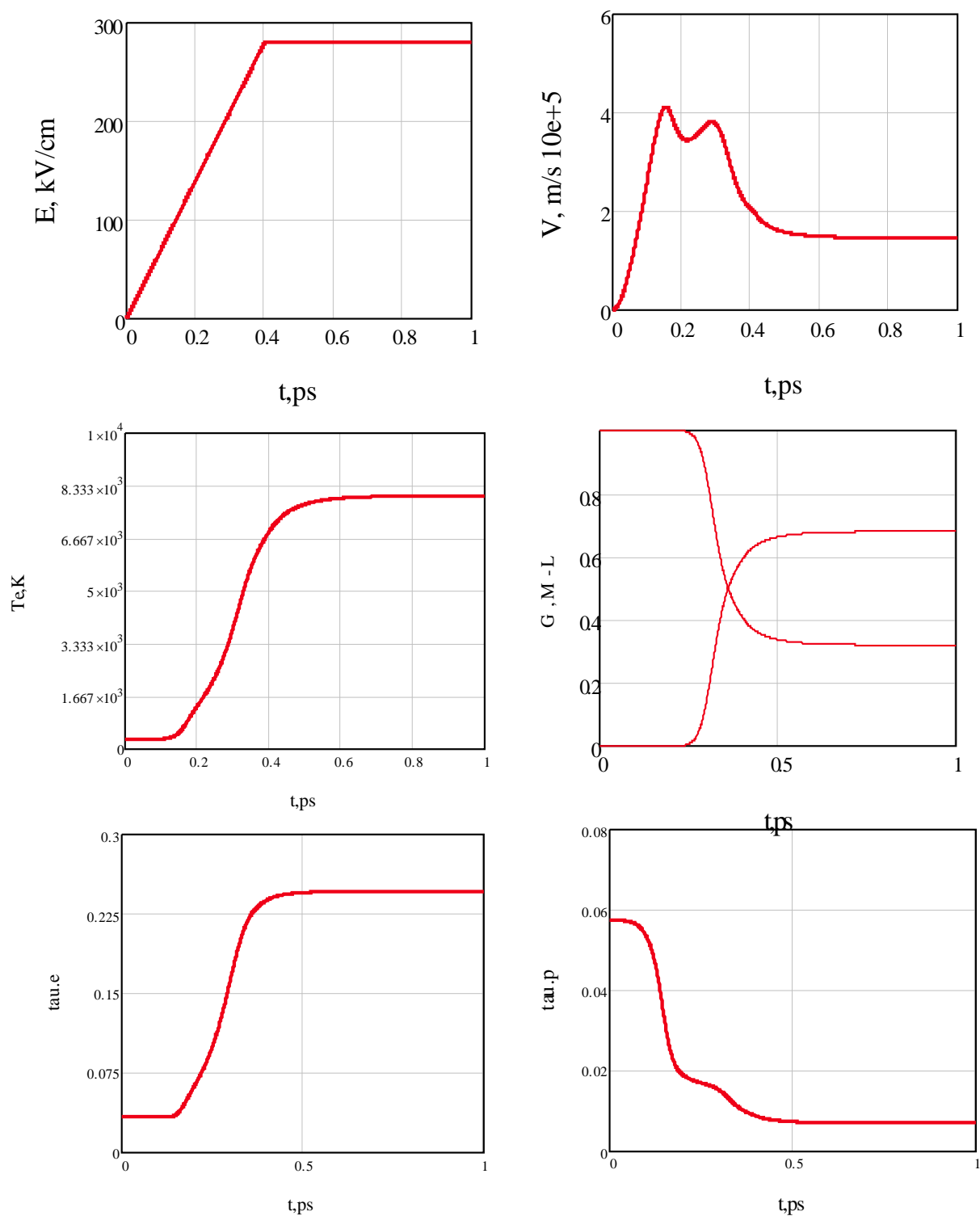


Рис 27. – Результати розрахунків динамічних реакцій на трапецеїдальний імпульс амплітудою 280 кВ/см з тривалістю фронту 0,4 пс для кубічного нітриду галію у часі

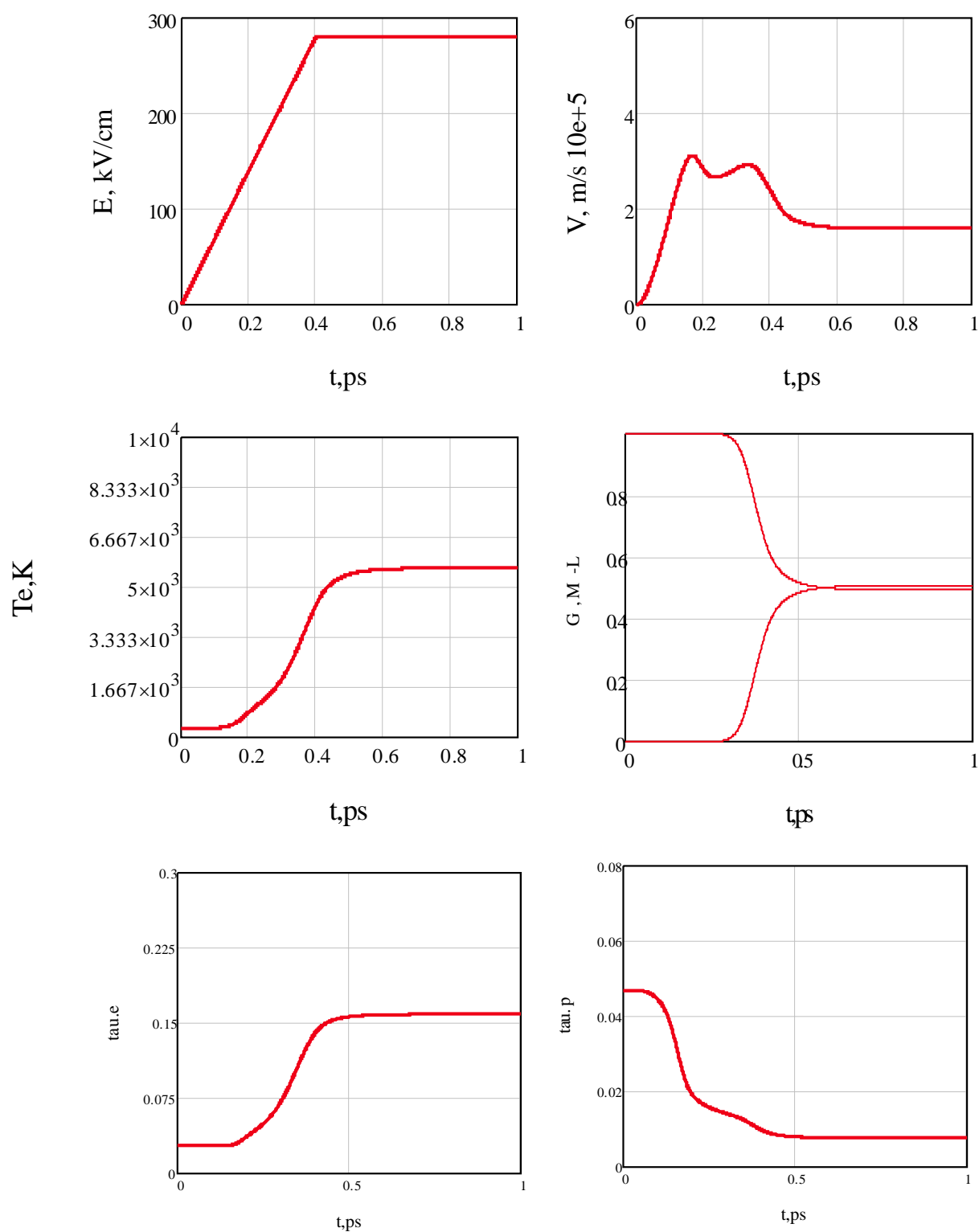


Рис 28. – Результати розрахунків динамічних реакцій на трапецеїдальний імпульс амплітудою 280 кВ/см з тривалістю фронту 0,4 пс для гексагонального нітриду галію у часі

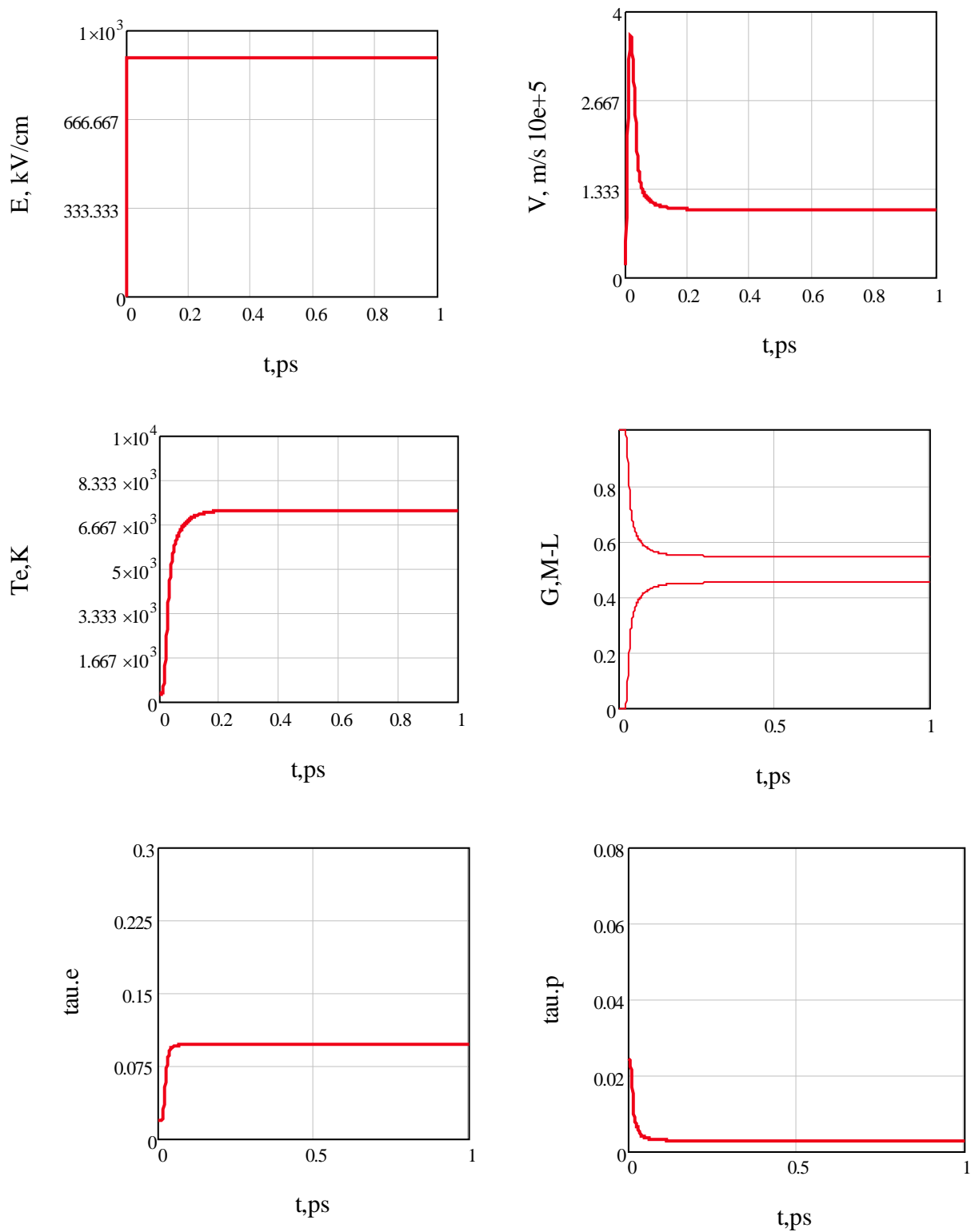


Рис 29. – Результати розрахунків динамічних реакцій на прямокутний імпульс амплітудою 900 кВ/см для кубічного нітриду алюмінію у часі.

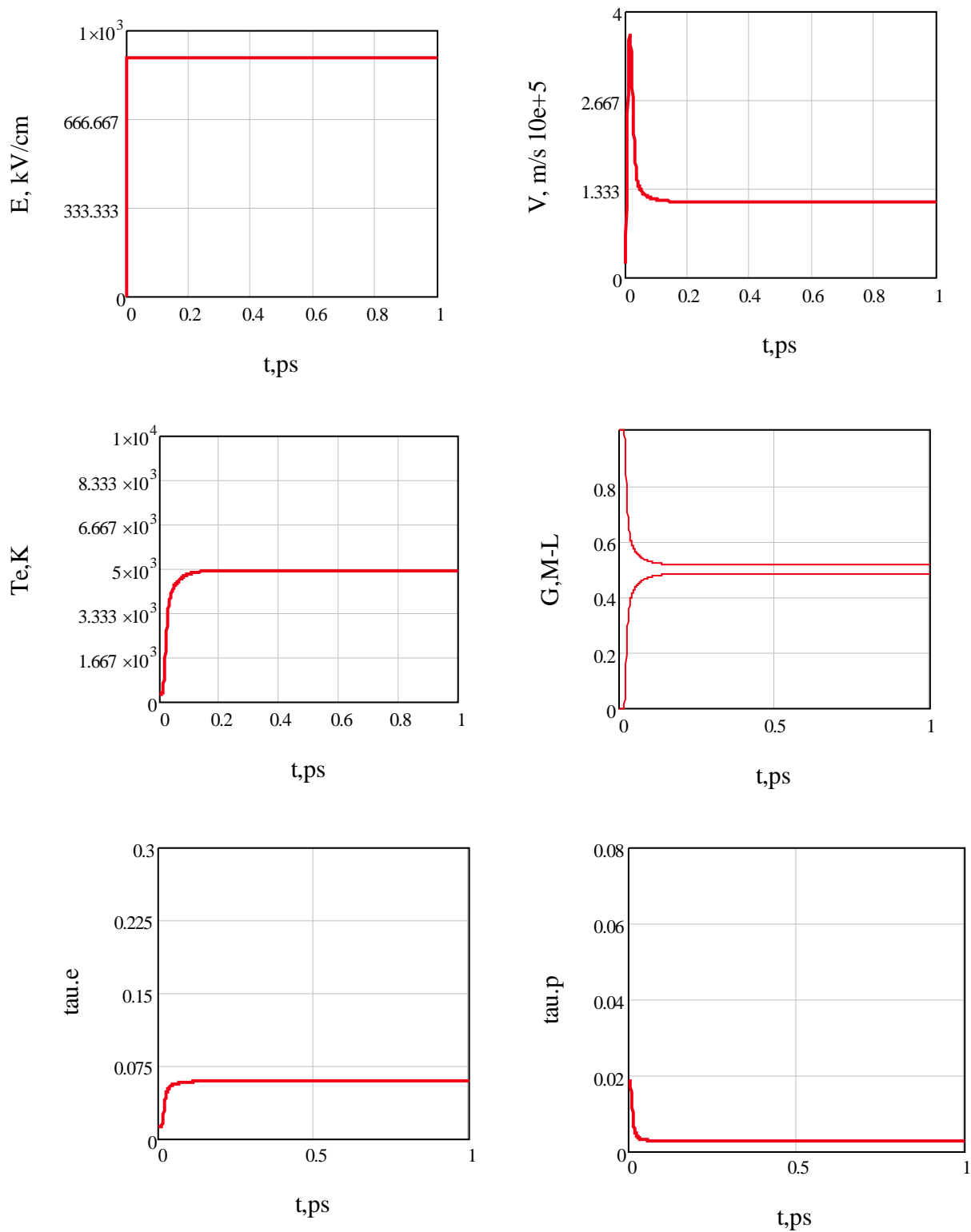


Рис 30. – Результати розрахунків динамічних реакцій на прямокутний імпульс амплітудою 900 кВ/см для гексагонального нітриду алюмінію у часі.

4.3 Просторовий балістичний проліт

Вже зазначалось, що в узагальненому випадку рівняння збереження характеризуються повною похідною за часом від функцій часу та координат $d/dt = \partial/\partial t + \vec{v}\partial/\partial\vec{r}$, яка включає як частинну похідну за часом, так і частинну похідну за координатами. Це дозволяє розглядати, зокрема, два типи задач моделювання:

- 1) динамічний аналіз дрейфових процесів у полі, змінному у часі, але просторово однорідному $d/dt = \partial/\partial t$.
- 2) аналіз дрейфу носіїв у статичному електричному полі, але просторово неоднорідному. Тоді у вихідних рівняннях треба обирати $d/dt = \vec{v}\partial/\partial\vec{r}$.

За першим випадком можна дослідити імпульсні характеристики, пов'язані зі «сплеском» швидкості, за другим можливо аналізувати «балістичний» рух носіїв.

Для доведення можливості використання моделі для просторової неоднорідності достатньо розглянути «одновимірний» випадок, у якому носії у матеріалі під час дрейфу вздовж координати x без впливу електричного поля потрапляють у точці $x = 0$ у сильне статичне поле.

Розрахуємо поведінку III-нітридів з кристалом типу вюрцит за напруженості електричного поля (150, 300, 500, 600) для InN, GaN та 500, 600, 1000, 1500 кВ/см для нітриду алюмінію.

Результати розрахунків наведено на рис. 31. Із графіків видно, що після потрапляння електрона у простір сильного поля помітен балістичний рух, себто рух без розсіювання, подібний до руху у вакуумі. Рух без розсіювання триває порядку 0,1 пс. За цей час носій встигає подолати відстань у десять долі мікрометра (що близько до довжини вільного пробігу) і відповідно прискоритися до 10^5 м/с.

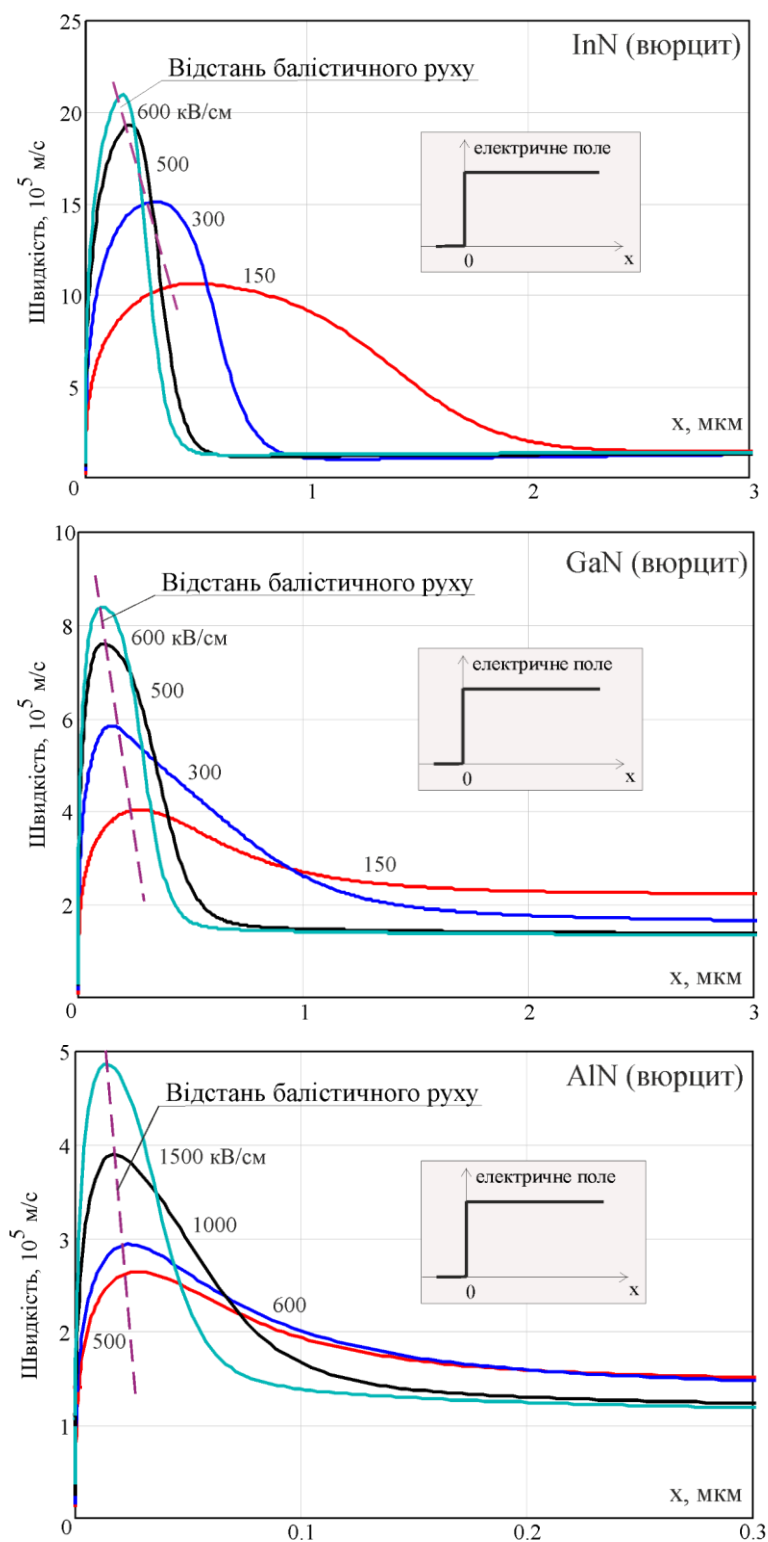


Рис 31. Відстань балістичного руху у просторово змінному імпульсному електричному полі

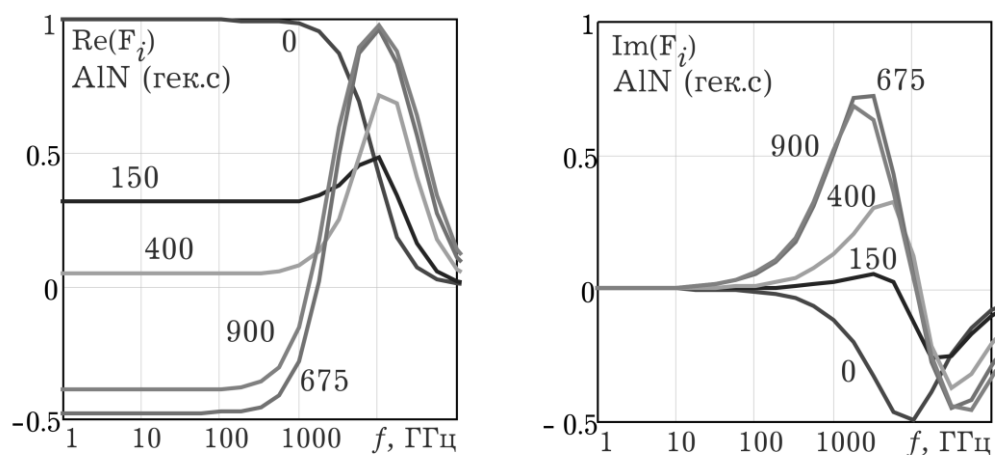
Після цього, як і в динамічному випадку, в результаті зіткнень, що починаються, підвищується електронна температура та відбуваються переходи до

верхньої долини. Типовий час релаксації зменшується на порядок і швидкість зменшується до значень, які відповідають рухливості у сильному полі.

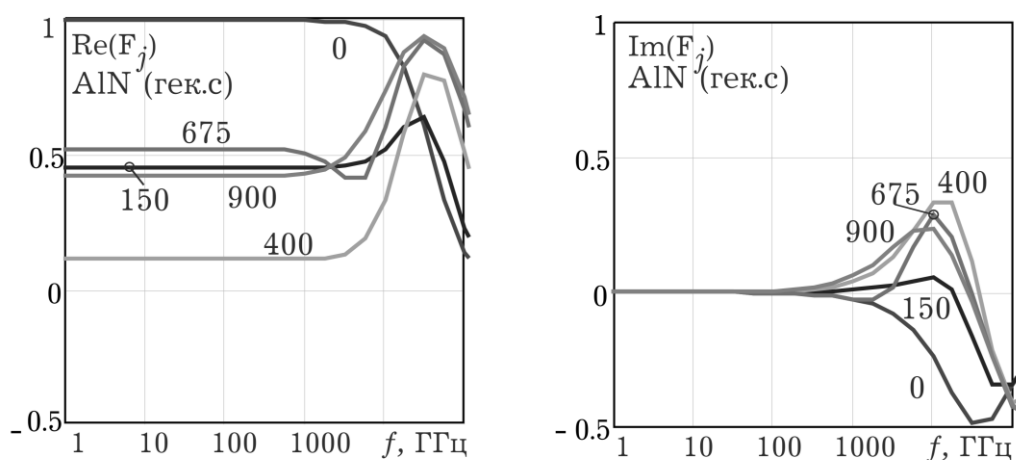
4.4 Моделювання високочастотної провідності III-нітридів

На рис. 32 – рис. 37 наведені частотні залежності дійсної і уявної частин електропровідності, нормованої на її статичне значення $\sigma = \frac{e^2 n \tau_{p0}}{m^*}$. Біля кривих вказано значення напруженості електричного поля в кВ/см.

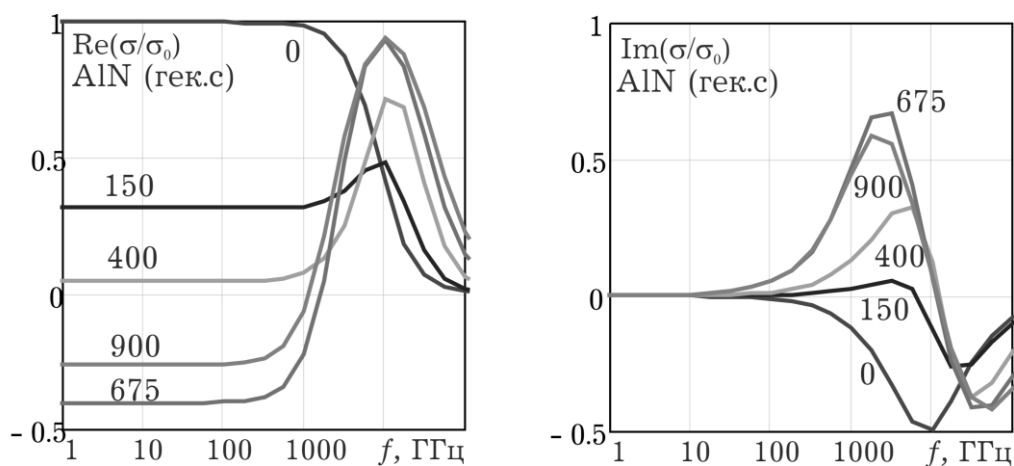
Частотна залежність σ_{ω} визначається множниками типу $(1 + i\omega t)^{-1}$, що включають три часові константи τ_p , τ_E і τ_M . Перший доданок у виразах для $F(\omega)$ залежить від частоти зіткнень, фактично від часу релаксації імпульсу, і пояснюється інерційністю змін струму відповідно до змін електричного поля. Другий доданок пов'язаний з фізичним переходом дрейфової швидкості в режим насичення, що потребує участі оптичних фононів, і можливий тільки за умови підвищення температури електронів. Але інерційність процесів розігрівання носіїв визначається також часом релаксації енергії, тому другий доданок містить ще й τ_E . Для процесів перерозподілу електронів по долинах характерна інерційність як процесів розігрівання носіїв, так і міждолинних переходів. Тому в третій доданок входять часи τ_E і τ_M (1.81). Важливо зазначити, що він пропорційний енергетичній відстані Δ_{ij} між долинами і саме він визначає від'ємні значення високочастотної електропровідності.



а



б



в

Рис 32. – Частотні залежності дійсної та уявної частин динамічної питомої електропровідності, нормованої на її статичне значення для нітриду *алюмінію* з гексагональною ґраткою:

а – для нижньої долини, б – для верхньої, в – результуюча

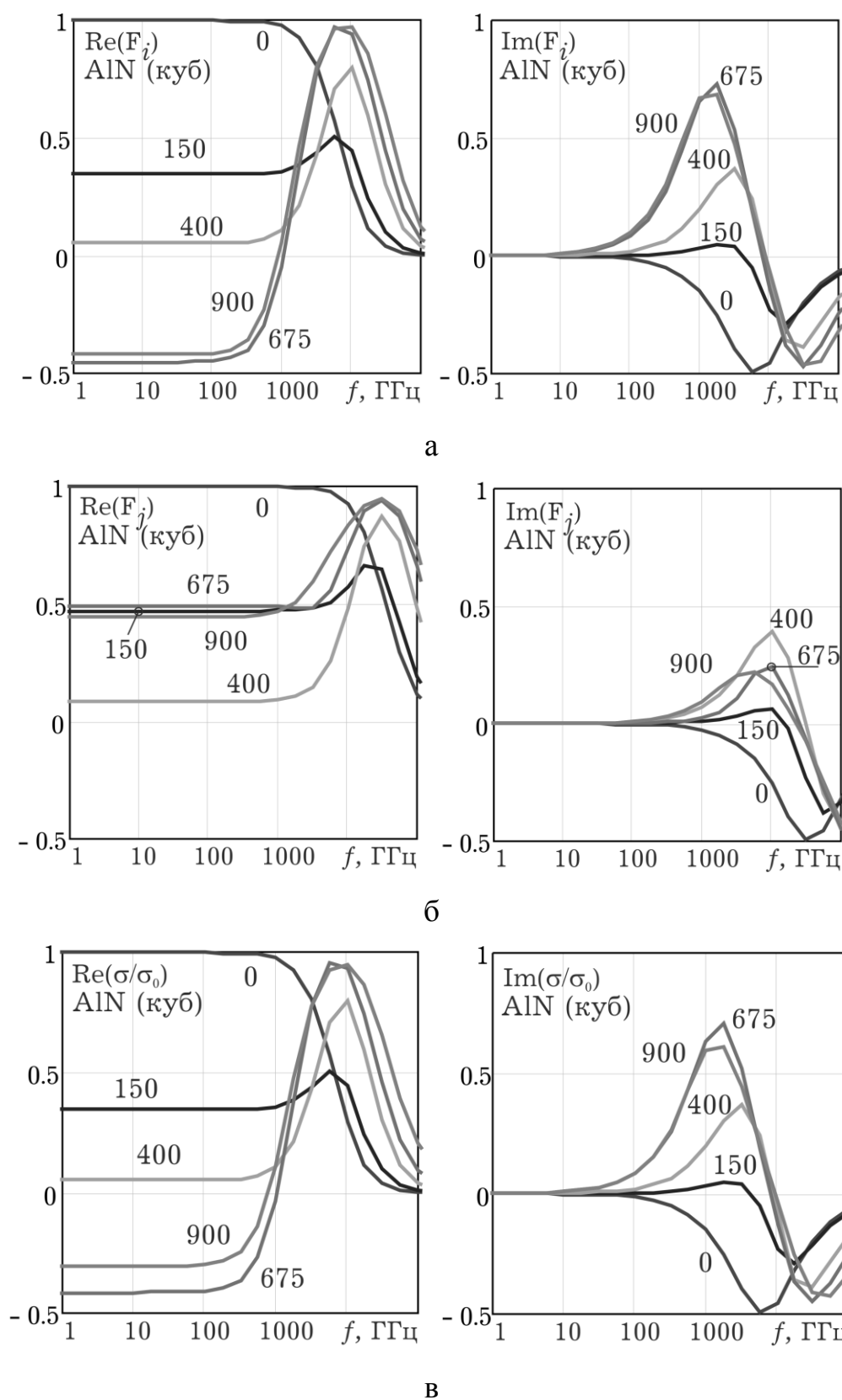
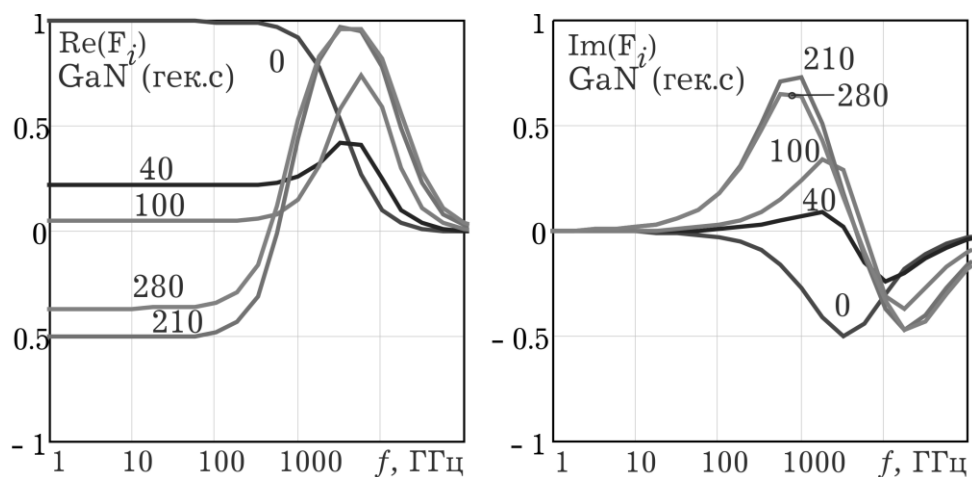
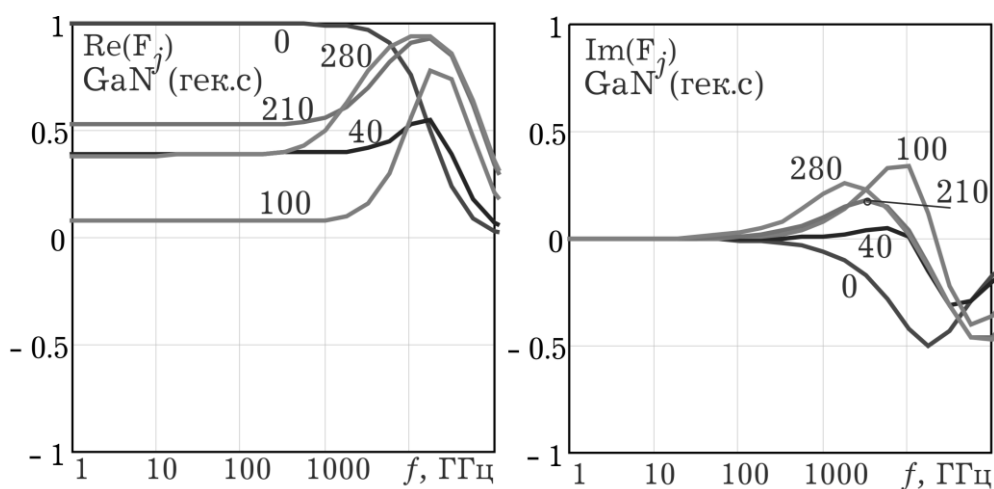


Рис 33. – Частотні залежності дійсної та уявної частин динамічної питомої електропровідності, нормованої на її статичне значення для нітриду *алюмінію* з кубічною ґраткою:

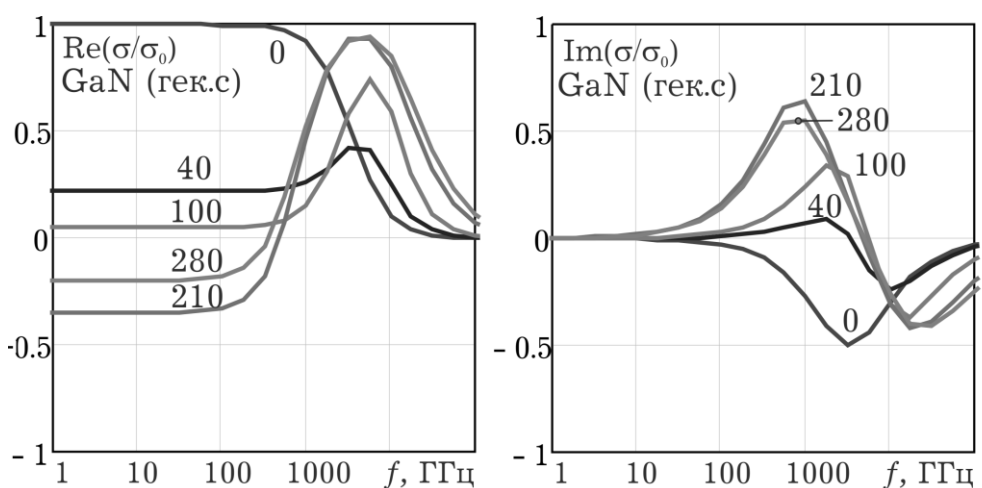
а – для нижньої долини, б – для верхньої, в – результуюча



а



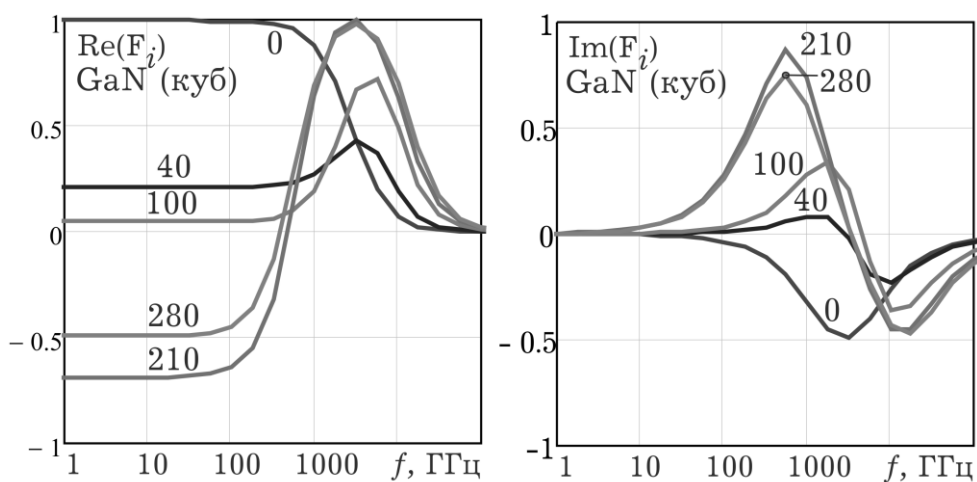
б



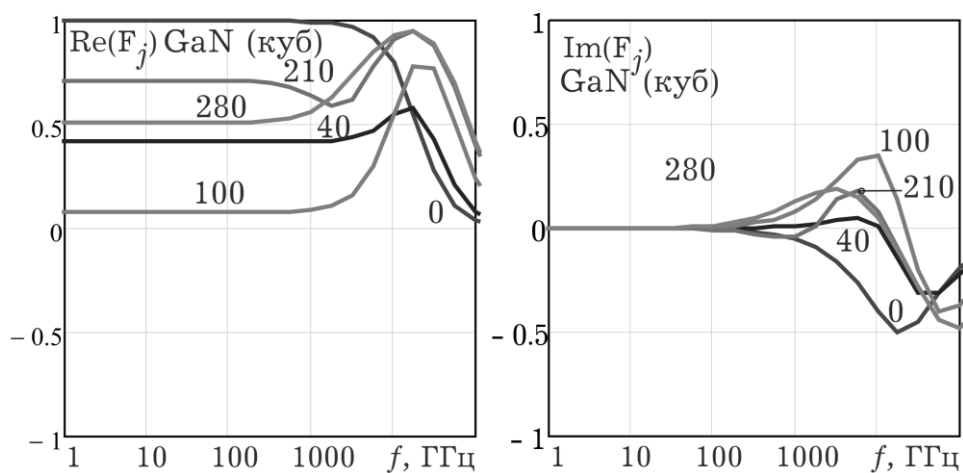
в

Рис 34. – Частотні залежності дійсної та уявної частин динамічної питомої електропровідності, нормованої на її статичне значення для нітриду *галию* з гексагональною ґраткою:

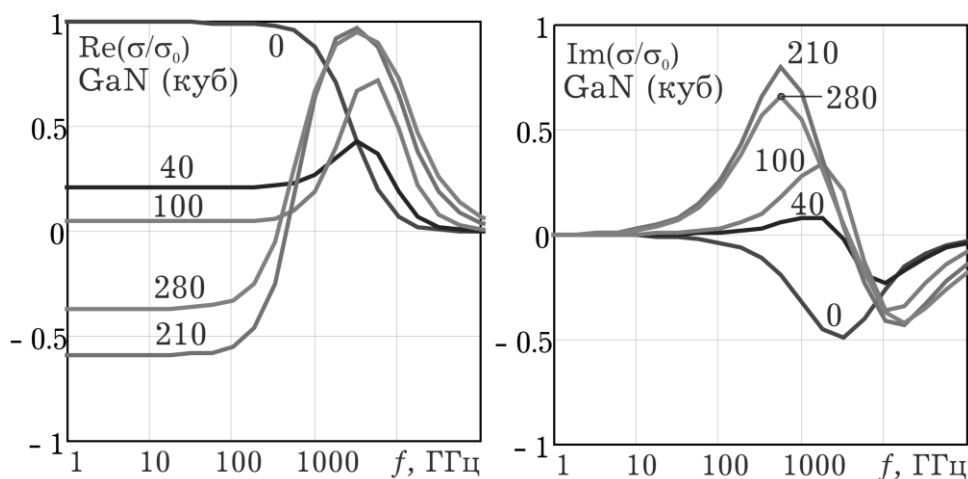
а – для нижньої долини, б – для верхньої, в – результуюча



а



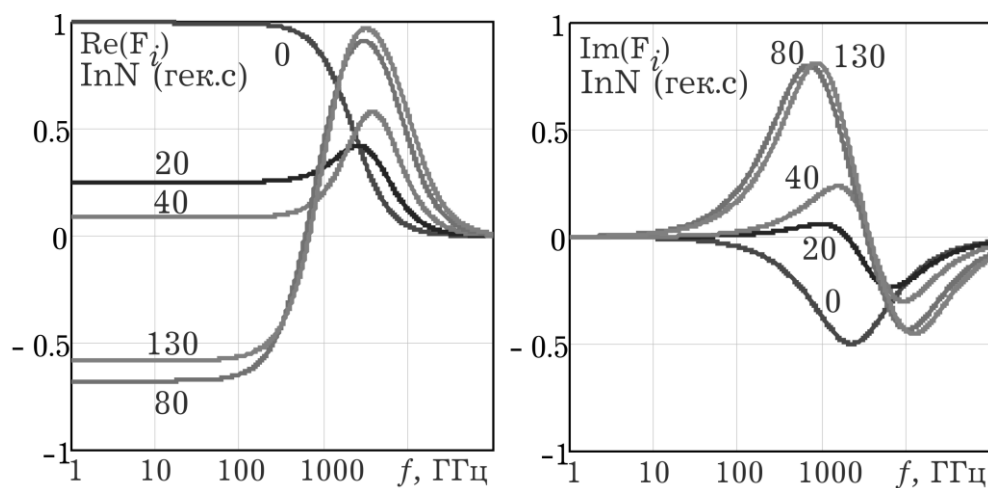
б



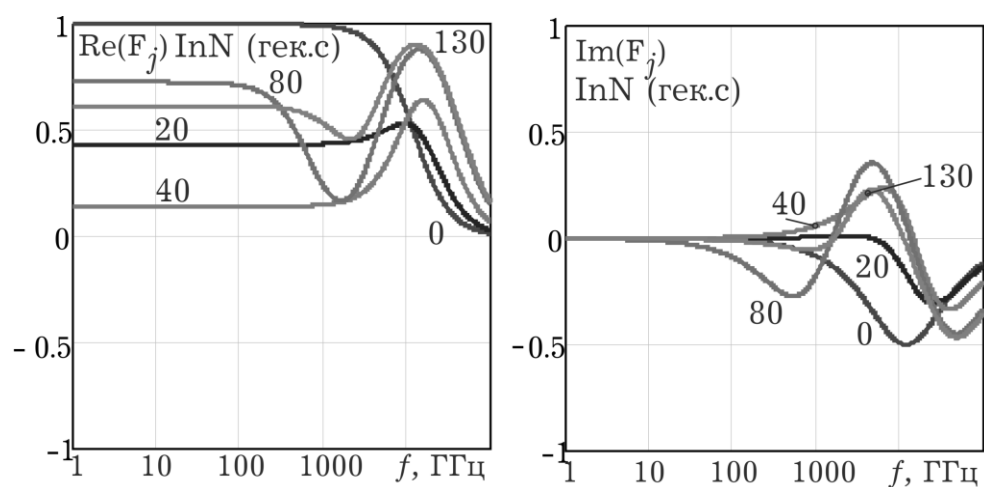
в

Рис 35. – Частотні залежності дійсної та уявної частин динамічної питомої електропровідності, нормованої на її статичне значення для нітриду галію з кубічною ґраткою:

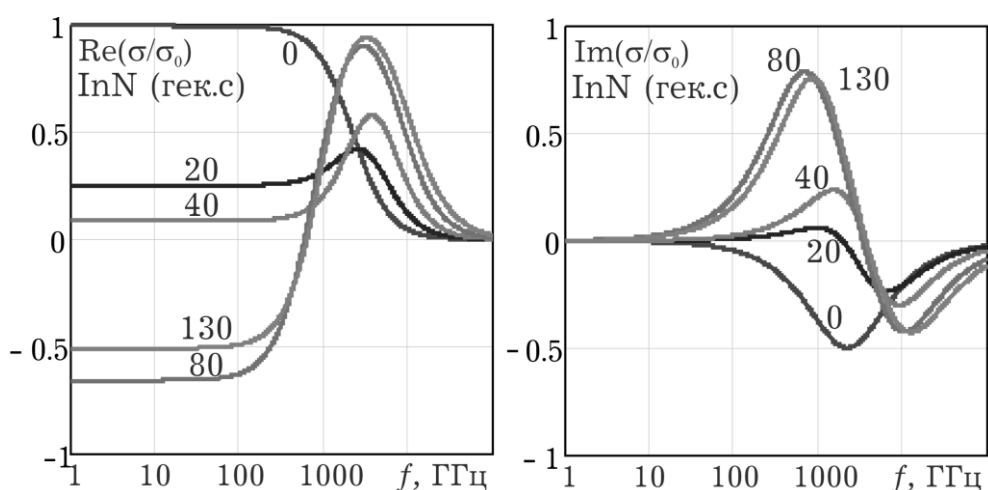
а – для нижньої долини, б – для верхньої, в – результуюча



а



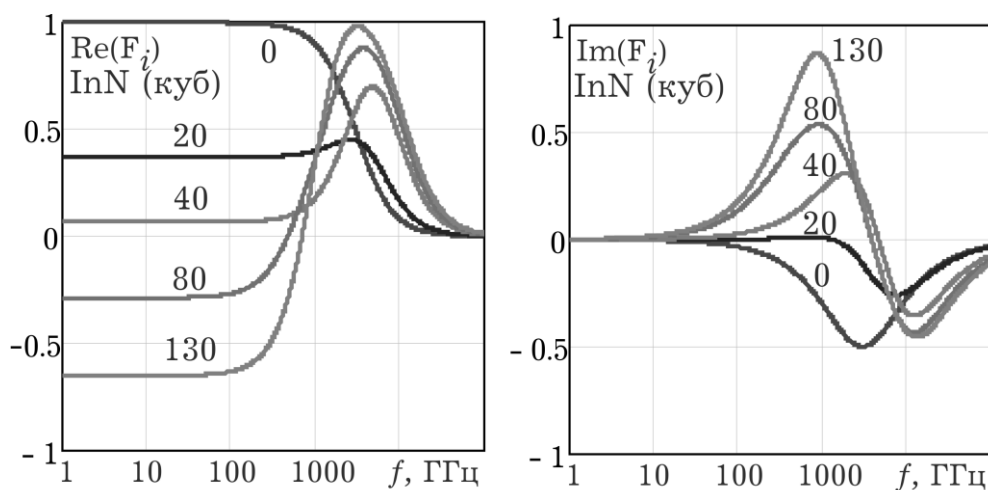
б



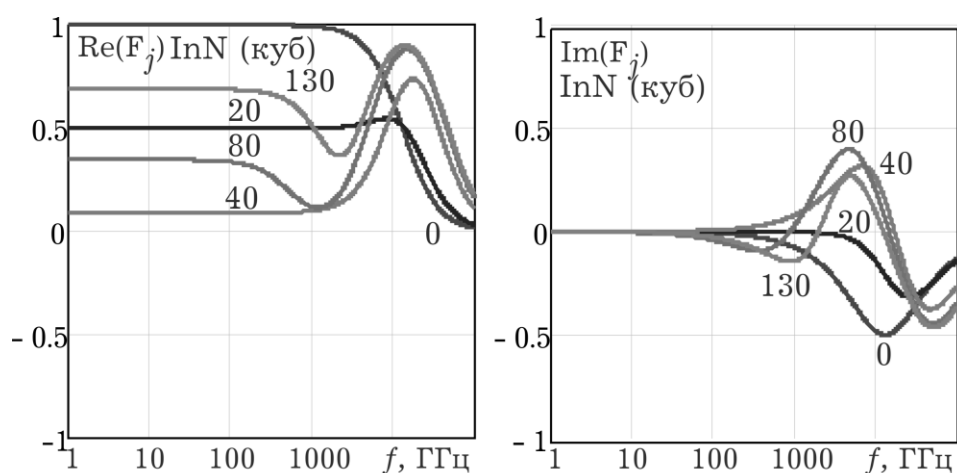
в

Рис 36. – Частотні залежності дійсної та уявної частин динамічної питомої електропровідності, нормованої на її статичне значення для нітриду *індію* з гексагональною ґраткою:

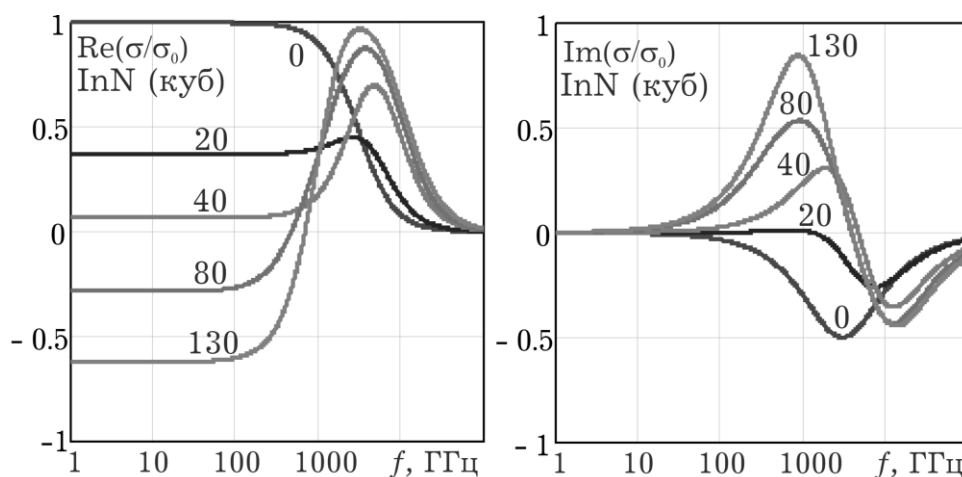
а – для нижньої долини, б – для верхньої, в – результуюча



а



б



в

Рис 37. – Частотні залежності дійсної та уявної частин динамічної питомої електропровідності, нормованої на її статичне значення для нітриду *індію* з кубічною ґраткою:

а – для нижньої долини, б – для верхньої, в – результуюча

4.5 Знаходження граничних частот

4.5.1 Використані припущення

Пряма пропорційність густини струму швидкості дрейфу носіїв $j = env$ дозволяє припускати, що отримані спектри Фур'є перетворення для імпульсних реакцій швидкості електронів у відносних одиницях відповідають спектральній густині струму. Відповідно, їх частотна залежність дозволяє знайти граничні максимальні частоти, за яких «зникає» провідність матеріалу, для різних зовнішніх умов.

Заселеність електронами долин дає змогу усереднювати часи релаксації імпульсу та енергії електронів, як і їх ефективну масу у кожній долині. Залежність заселення долин від часу враховано за допомоги часів релаксації між-долинних переходів [8].

Система диференціальних рівнянь (1.91), (1.92) та популяції долин у дво-долинному наближенні отримана так само, як і в [18].

Система диференціальних рівнянь була розв'язана методом Рунге-Кутти IV порядку.

Зовнішній імпульс електричного поля має бути δ -подібним імпульсом напруженості, але ситуація спрощується для визначення верхньої межі частоти. Найбільш високочастотні компоненти Фур'є визначаються переднім фронтом перехідного процесу через явище перевищення швидкості дрейфу («сплеск», *overshoot*) [59], що дозволяє використовувати прямокутний імпульс.

4.5.2 Аналіз спектральної характеристики.

Детально розглянемо спектральну характеристику швидкості дрейфу, отриману перетворенням Фур'є. Для можливості порівняння з результатами інших експериментів та моделей ми зупинились на GaN з кристалічною ґраткою типу вюрцит під впливом електричного поля 400 кВ/см

Якщо аналізувати безпосередньо отриману спектральну характеристику [22], то звертають на себе увагу два моменти:

- «хвіст» спектральної характеристики фактично нескінченний, а демонструє значення відмітно вище 0 до 10 ТГц;
- у околі 1 ТГц (на рис. 38 узяті у зелене коло) спостерігаються нерівномірності падіння спектральної густини.

Обидва моменти пояснюються особливостями перетворення Фур'є і детальна форма нерівномірностей залежить від кількості точок дискретизації, а відповідно і від кількості етапів наближення.

У роботі [11] та [19] запропоновано робити лінійну апроксимацію останньої «гладкої» частини спектральної густини до перетину з віссю абсцис. І саме цю точку перетину вважати оцінкою максимальної частоти.

Апроксимуюча пряма зображена пунктиром синього кольору у врізці на рис. 38, частина *b*. Точка перетину з віссю x позначена та очікується у діапазоні 700-800 ГГц.

Аргументувати доречність цього спрощення ми пропонуємо наступним чином:

- нахил гладкої частини у широкому діапазоні частот відповідає фізичному змісту процесу, що вже сформовано;
- лінійна апроксимація звужує діапазон частот, але ми з'ясовуємо саме оцінку обмежену «зверху»;

- апроксимації більшого порядку не мають під собою практичної аргументації, але безпідставно збільшують максимальну частоту і потребують більше ресурсів для розрахунку і побудови;
- можливість вважати максимальною частотою координату по осі x регіон закінчення «гладкої» частини (малинове коло у врізці на рис. 38, частина b) також існує, але більш важка для визначення і повністю ігнорує подальшу частину спектральної характеристики, а насамперед нахил «гладкої» частини.

Усі подальші зображення спектральних характеристик надані з апроксимаціями за поданим вище методом.

4.5.3 Результати моделювання.

Рішення системи для різних значень прямокутного імпульсу напруженості електричного поля показано на рис. 39, рис. 41 і рис. 43.

У наявному аналізі перевищення швидкості дрейфу носіїв спостерігалось протягом імпульсів тривалістю до 0,2 пікосекунд. Гарне узгодження з [36], [19] спостерігалось на характеристиках імпульсної швидкості, як для гексагональних (вюрцит), так і для кубічних (цинкова обманка) кристалічних решіток досліджуваних III-нітридів.

Швидке перетворення Фур'є з використанням 2048 точок відбору проводилося з отриманими вище імпульсними відгуками швидкості дрейфу носіїв.

Спектри імпульсу швидкості показані на рис. 40 для обох (гексагональних і кубічних) решіток нітриду індію.

Відповідно, рис. 42 і рис. 44 дозволяють вивчити спектри імпульсів швидкості для гексагональних (вюрцит) і кубічних (цинкова обманка) решіток GaN і AlN.

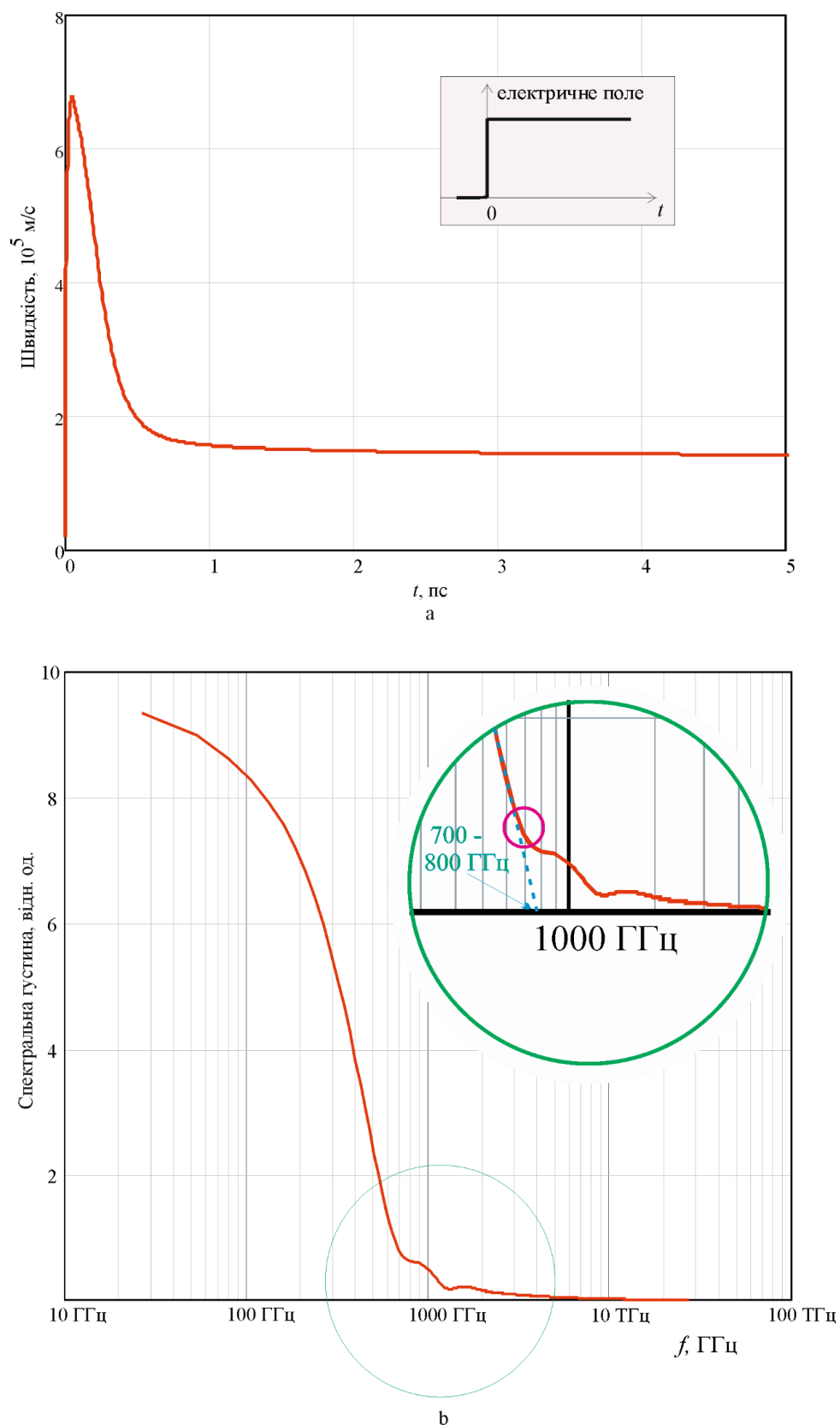


Рис 38 Імпульсна реакція швидкості дрейфу у GaN (кристалічна структура типу вюрцит) для амплітуди електричного поля 400 кВ/см (а) та відповідна спектральна характеристика (б).

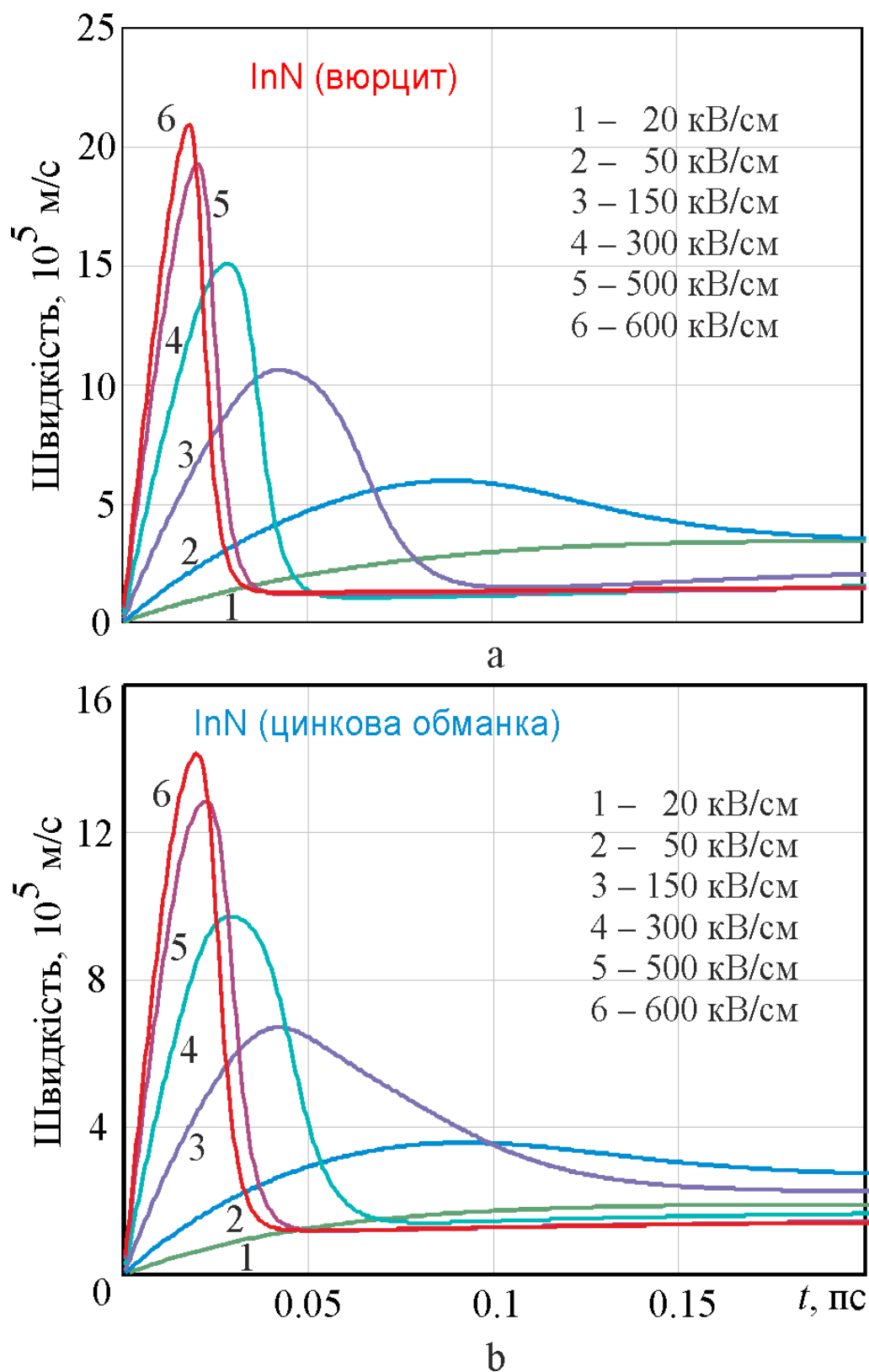


Рис 39 Імпульсні реакції швидкості дрейфу у сполуках InN для різних значень амплітуди електричного поля. Кристалічні структури типу вюрцит (a) та цинкова обманка (b).

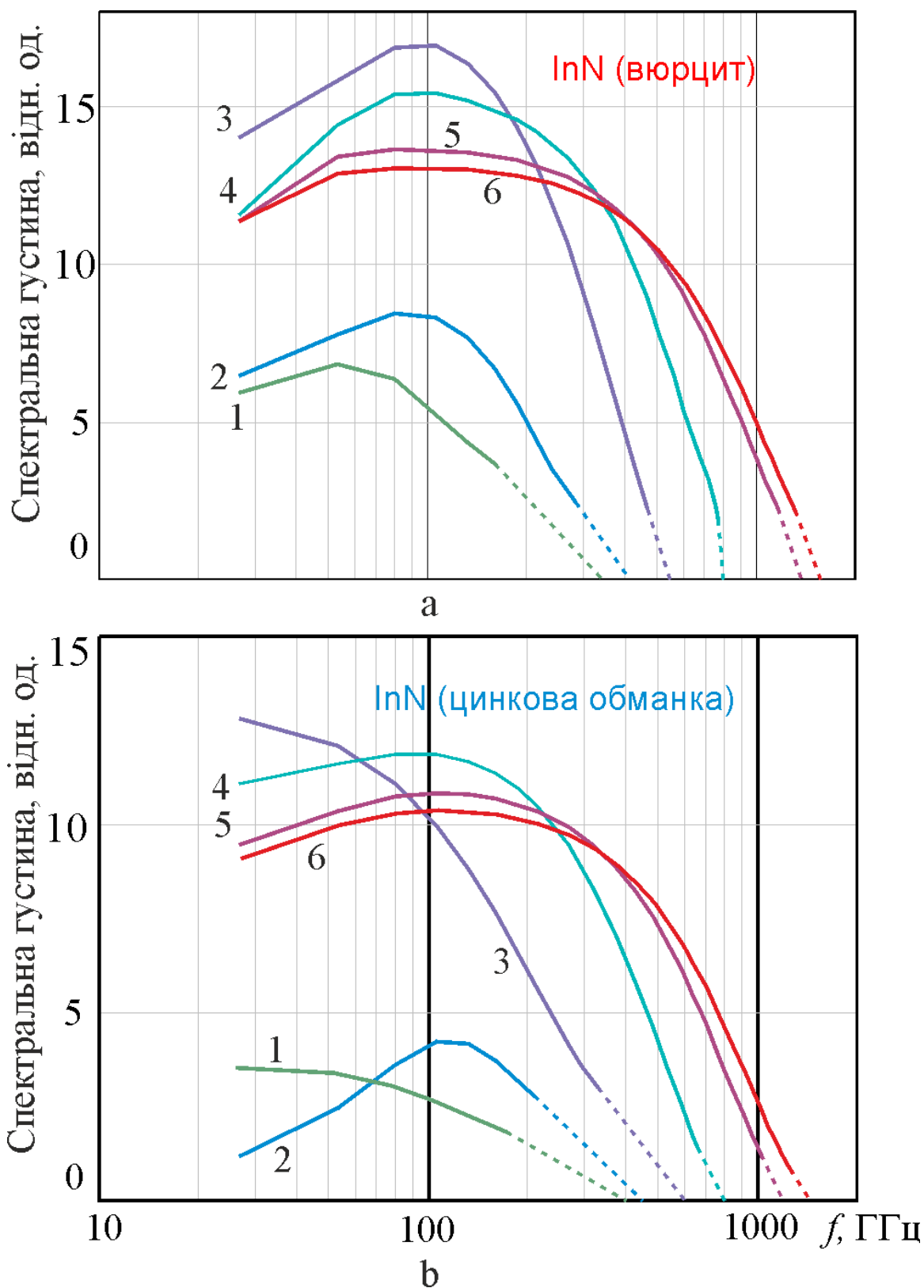


Рис 40. Спектральні характеристики швидкості дрейфу у сполуках InN для різних значень амплітуди електричного поля. Кристалічні структури типу вюрцит (a) та цинкова обманка (b).

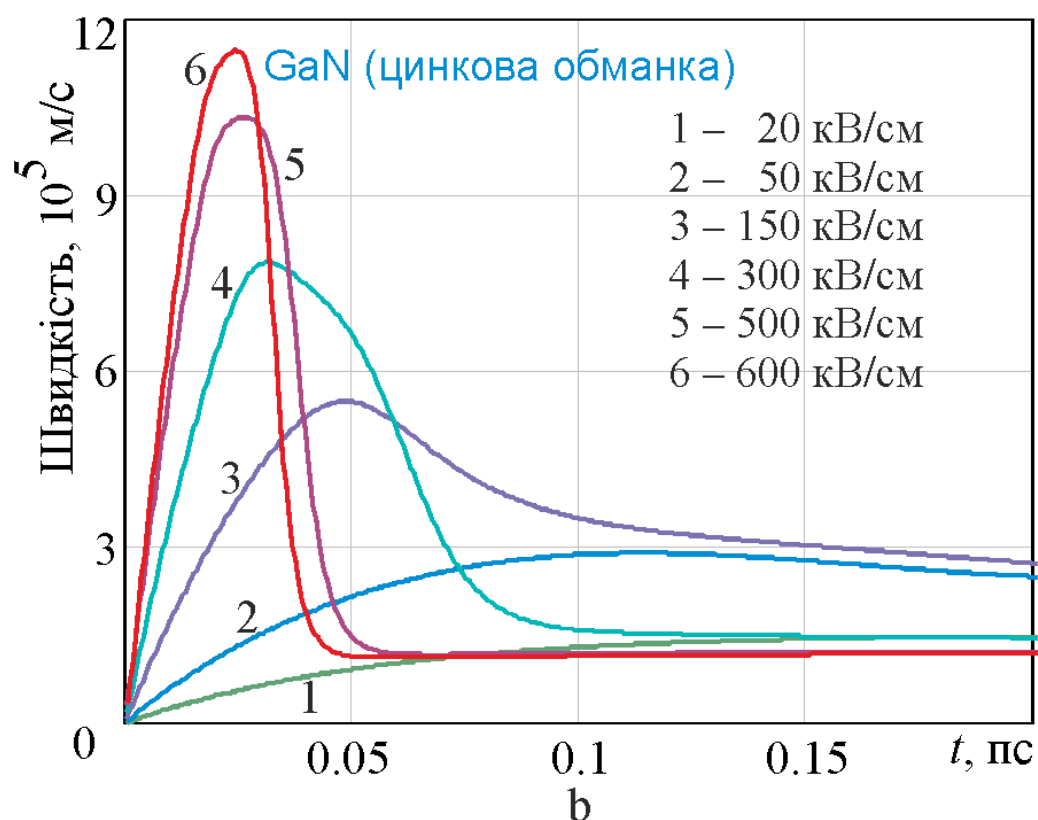
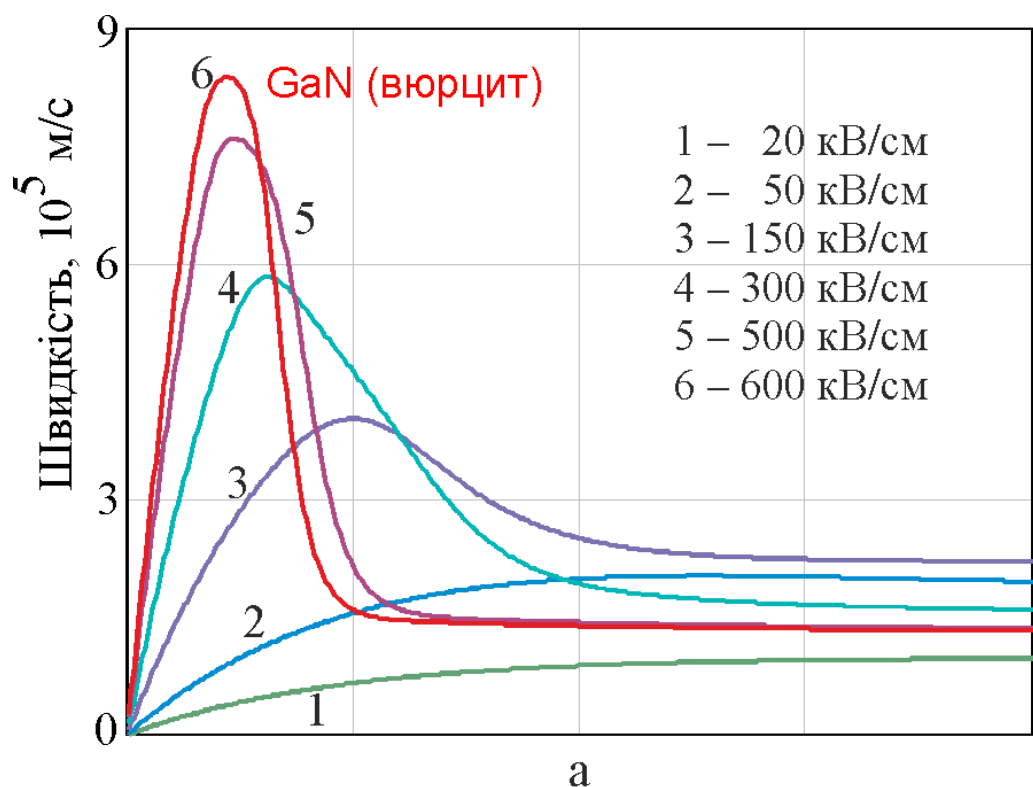


Рис 41. Імпульсні реакції швидкості дрейфу у сполуках GaN для різних значень амплітуди електричного поля. Кристалічні структури типу вюрцит (а) та цинкова обманка (б).

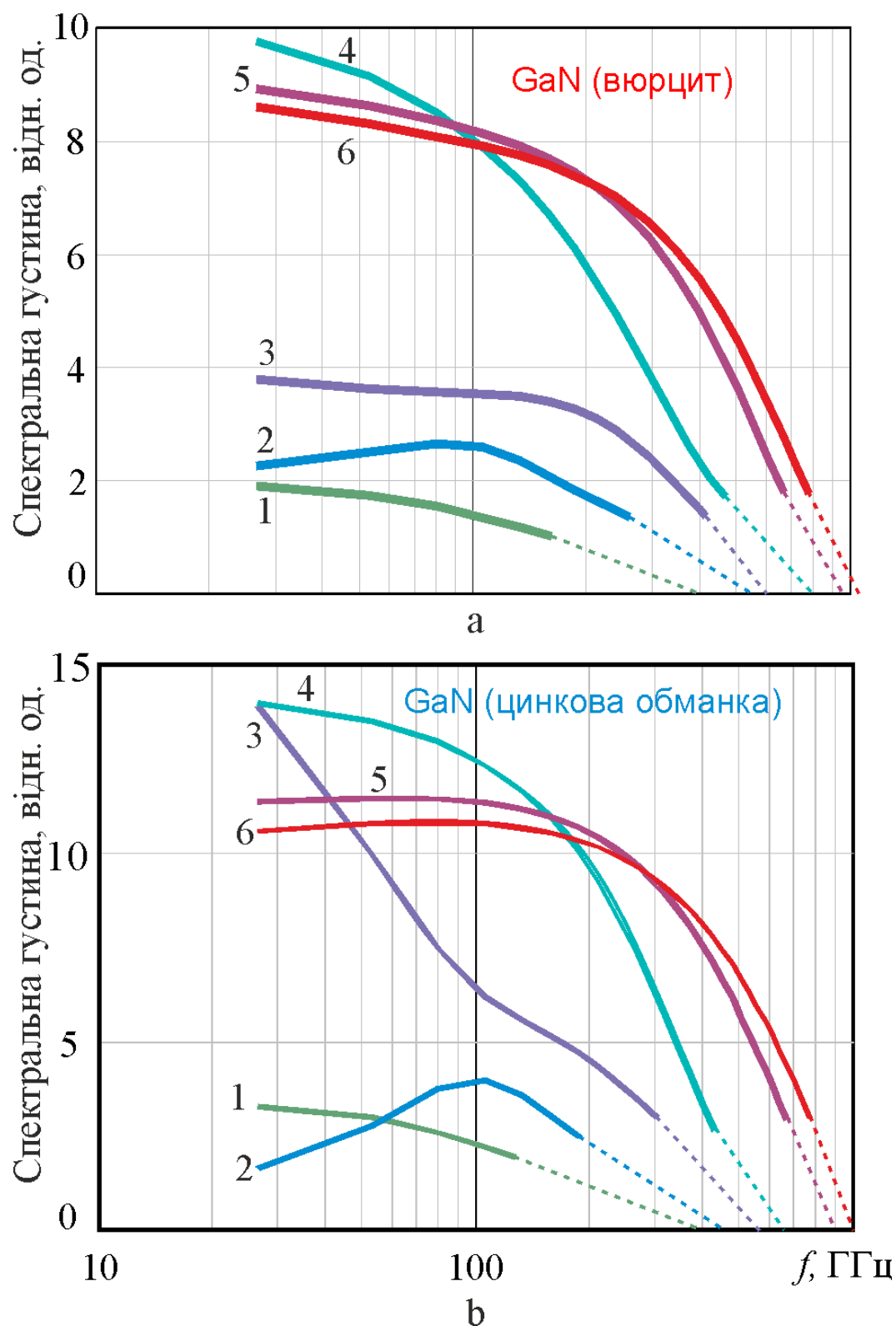


Рис 42. Спектральні характеристики швидкості дрейфу у сполуках GaN для різних значень амплітуди електричного поля. Кристалічні структури типу вюрцит (а) та цинкова обманка (b).

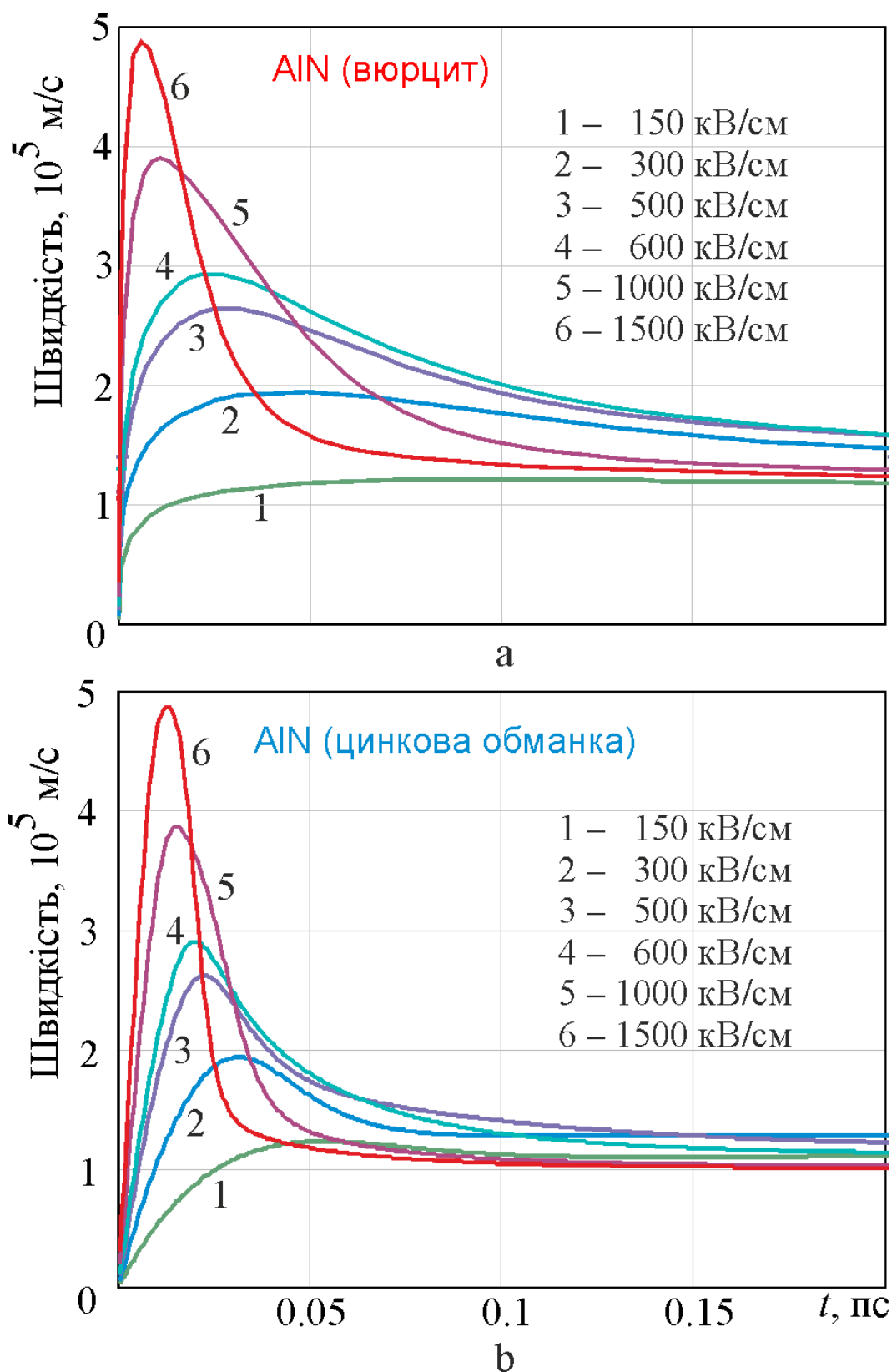


Рис 43. Імпульсні реакції швидкості дрейфу у сполуках AlN. Кристалічні структури типу вюрцит (а) та цинкова обманка (б).

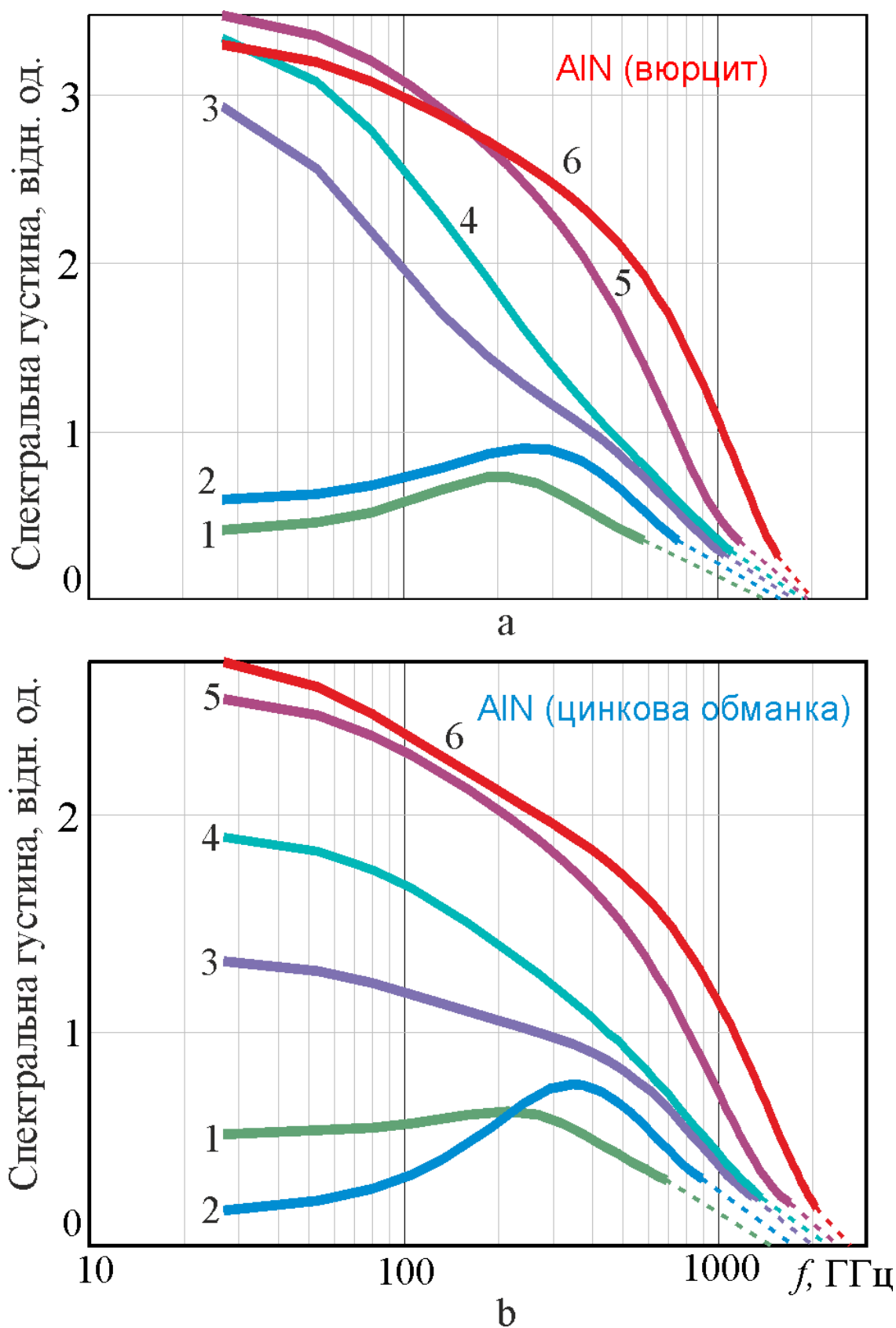


Рис 44. Спектральні характеристики швидкості дрейфу у сполуках AlN для різних значень амплітуди електричного поля. Кристалічні структури типу вюрцит (a) та цинкова обманка (b).

4.6 Висновки за результатами моделювання.

Проведемо якісний аналіз графіків спектральної густини з декількох точок зору.

Пропонуємо додатково узагальнити спостереження та висновки стосовно кривих спектральної густини у порівнянні з [18], що у свою чергу дозволяє сформулювати новий підхід до вибору критерію обмеження спектру. Таке узагальнення уможливорюється завдяки одночасному спостереженню та моделюванню всіх III-нітридів за єдиним методом за єдиною моделлю:

- 1) порівнюючи результати моделювання за різних заданих значень напруженості електричного поля, можливо відстежити кореляцію між відповідною характерною ділянкою на поле-швидкісній характеристиці носіїв та формою графіка спектральної густини перетворення Фур'є. Ділянки з омічною (прямопропорційною) залежністю швидкості дрейфу від поля характеризуються кривими спектральної густини з чітко вираженими максимумами. Відповідно для спадної ділянки характерне монотонне зростання спектральної густини зі зменшенням частоти. Це явище по різному проявляє себе для різних напівпровідників у полях різної напруженості. Так, для нітриду індію практично для всіх кривих існує максимум, але криві для кубічних і для гексагональних кристалічних решіток для значень, більших 100 кВ/см, помітно відрізняються за формою. Однак для нітриду галію явище спостерігається лише до 100 кВ/см для кубічних і, практично, до 150 кВ/см для кристалів типу вюрцит. Відповідно, для нітриду алюмінію це до 500 кВ/см і до 600 кВ/см.

Оскільки різним типовим ділянкам поле-швидкісної характеристики властиве різне переважання тих чи інших видів розсіювання, то на перший погляд здається контрінтуїтивним вплив механізму розсіювання на спектральні властивості. Але усвідомивши, що кожен вид розсіювання носіїв має свій час

релаксації і відповідно свою частоту зіткнень, неважко зрозуміти, що продемонстрована кореляція можлива.

2) типовою формою цих кривих для сильних полів є практично постійні спектральні щільності в низькочастотній частині і її спад у напрямку збільшення частот. Для визначення граничних частот у цих умовах необхідно вибрати додаткові критерії або методику спрощення для обмеження математично нескінченного спектру. Нами вперше запропоновано використання лінійної апроксимації нахилу у високочастотній ділянці. Точку перетину апроксимуючої частини з віссю абсцис можна розглядати як оцінку частоти максимуму матеріалу для вибраних значень полів. Така оцінка здається нам цілком доцільним та достатнім спрощенням, і на відміну від також нашого підходу [18], не вимагає порівняння з максимальною амплітудою спектральної щільності. Тобто цей критерій застосовано до всіх спектральних характеристик, як з максимумами, так і з відносно незмінними спектрами.

Саме такі лінійні наближення відображено штриховими лініями на рис. 40, рис. 42 та рис. 44. Значення частот, на яких ми прогнозуємо перетин з віссю абсцис, зібрані разом і наведені в Табл. 2

Однак для більш прямого та зрозумілого порівняння з рис. 19, а саме з частотою існування від'ємної динамічної провідності, більш доречно дослідити рис. 45.

Табл. 2. Максимальні частоти III-нітридів за різних значеннях електричного поля.

\mathcal{E} , кВ/см	f , ГГц					
	InN (кубічна)	InN (гексаг.)	GaN (кубічна)	GaN (гек- саг.)	AlN (кубічна)	AlN (гексаг.)
20	400	350	400	400	—	—
50	450	400	450	550	—	—
150	600	550	550	600	1050	1040
300	800	800	650	800	1075	1060
500	1020	1030	900	950	1100	1070
600	1050	1060	1000	1020	1120	1080
1000	—	—	—	—	1130	1090
1500	—	—	—	—	1150	1100

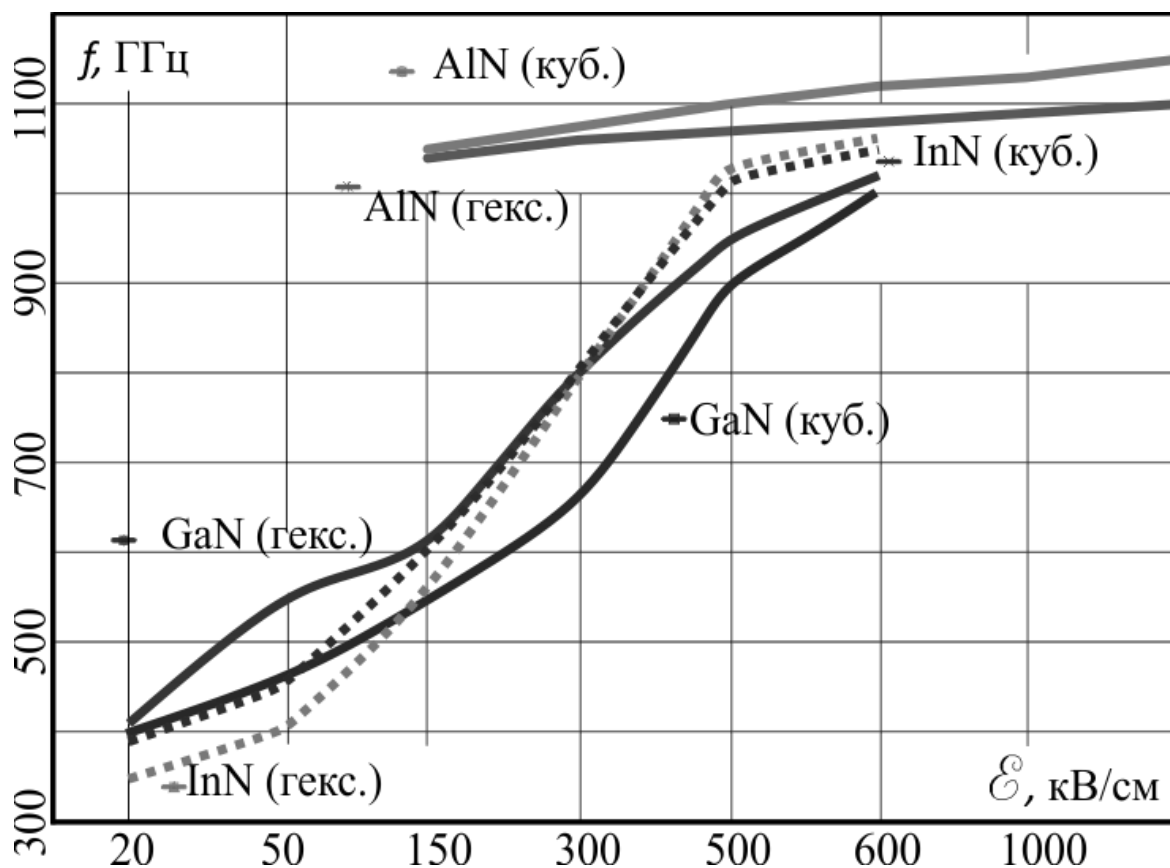


Рис 45. Максимальні частоти GaN, AlN та InN.

Для всього діапазону полів, найвищі значення частот відсічки демонструє нітрид алюмінію, і ми рекомендуємо зосередитися на системних досліджен-

нях та спробах практичної реалізації пристроїв за використання саме цього матеріалу.

Запропонована й наведена модель може служити підтвердженням перспектив подальших досліджень і використання III-нітридів з розрахунковим значенням відсічки у високочастотній області близько тисячі гігагерц.

Додатково звертаємо увагу, що модель можливо використовувати і для розрахунку параметрів реальних пристроїв, що продемонстровано у наших роботах [56, 12].

Запропонований удосконалений метод [18] для оцінки частотних граничних властивостей дозволяє забезпечити якісне порівняння різних багатодлинних напівпровідникових матеріалів. Це також можливо для частот, які набагато нижчі за граничні для існування від'ємної динамічної провідності. Метод найкраще працює, коли спостерігається «сплеск» (overshoot) швидкості дрейфу. На прикладі III-нітридів застосовність методу продемонстрована для матеріалів різної ширини забороненої зони, типів кристалів і широкого спектра електричних полів.

Оптимізація і прискорення підготовчого відбору напівпровідникового матеріалу за заданими параметрами бажаного пристрою можлива завдяки аналітичності та відносної легкості способу. Альтернативою є виконання громіздких розрахунків на базі методу Монте-Карло з надмірними даними. Або навіть дорогі та екологічно небезпечні натурні експерименти з реальними матеріалами на початковому етапі проектування бажаних напівпровідникових приладів.

ВИСНОВКИ ПО РОБОТІ

1. Запропоновано метод моделювання динамічних характеристик багатодолинних напівпровідникових матеріалів групи $A^{III}B^V$, який базується на кінетичному рівнянні з модельними спрощеннями у релаксаційному наближенні, придатний для аналізу електронного транспорту у сильному електричному полі і дозволяє моделювати динамічні ефекти, специфічні для субмікронних розмірів.
2. Вдосконалена математична модель електронного транспорту у вигляді системи диференціальних рівнянь у частинних похідних включає аналітичні вирази для часів релаксації різних видів розсіювання, зокрема міждолинного (вперше в світі). Отримані вирази для розрахунку часів релаксації дозволяють аналізувати внесок окремих видів розсіювання на параметри матеріалів.
3. Описані процеси розігрівання електронного газу у застосуванні до багатодолинних напівпровідників групи $A^{III}B^V$ у сильних електричних полях визначають особливості протікання основних процесів електронного транспорту і, відповідно, найважливіші параметри матеріалів.
4. На основі досліджень встановлено особливості: а) руху носіїв III-нітридів у сильних змінних у часі та просторі електричних полях; б) розподілу концентрації носіїв у долинах у залежності від електричного поля; в) закономірності імпульсної провідності, що в свою чергу дало змогу зробити порівняльний аналіз різних методів оцінки граничних частот багатодолинних напівпровідників і запропонувати новий, якій відрізняється легкістю розрахунків, співпадінням з результатами інших науковців та більшим діапазоном можливих значень зовнішнього електричного поля.

5. Вперше, на доданок до розрахунків верхніх граничних частот не тільки за умови існування ВДП чи режиму генерування у діоді Гана, досліджено спектральні характеристики відгуку дрейфової швидкості на різні амплітуди імпульсів електричного поля, за якими отримано граничні частоти для різних матеріалів, які перевищують значення 1000 ГГц, особливо для нітриду алюмінію. Цікаво, що помічено вплив механізму розсіювання на спектральні властивості. Але, зважаючи на те, що кожен вид розсіювання має свій час релаксації і відповідно свою частоту зіткнень, неважко зрозуміти, що така кореляція є природньою.
6. Отримано характеристики тестових твердотільних структур та зроблено порівняння модельних та експериментальних даних.

ДОДАТОК. ЛІСТІНГИ MATHCAD.

Д.1 Параметри InN. Кубічна кристалічна решітка.

$$\begin{array}{llllll}
 m_0 := 9.1 \cdot 10^{-31} & (\text{кг}) & k := 1.38 \cdot 10^{-23} & (\text{Дж/К}) & h := 1.055 \cdot 10^{-34} & (\text{Дж/с}) \\
 e := 1.6 \cdot 10^{-19} & (\text{Кл}) & \epsilon_0 := 8.842 \cdot 10^{-12} & (\text{Ф/м}) & a_0 := 0.53 \cdot 10^{-10} & (\text{м}) \\
 \delta := 10^{-5} & & & & & \text{ORIGIN} := 0
 \end{array}$$

Параметры материала:

диэлектрич. проникність: статическая $\epsilon_s := 14.86$ высокочаст. $\epsilon_v := 8.04$

средняя

$$\bar{\epsilon} := 12$$

$$BC := \frac{1}{\epsilon_v} - \frac{1}{\epsilon_s}$$

плотность $\rho := 6.81 \cdot 10^3$ (кг/м³)

скорость звука (продольна:) $v := 6.8 \cdot 10^3$ (м/с)

акустический деформационный потенциал $Da := e \cdot 6.8$ (эВ)

константа междолинной связи $D_M := e \cdot (11 \cdot 10^{10})$ (эВ/м)

энергии оптич. фононов: $\hbar\omega_0 := e \cdot 0.058$ (эВ)

энергии междолинных фононов: $\hbar\omega_M := e \cdot 0.05$ (эВ)

междолинные расстояния $\Delta r_L := e \cdot 1.0$ (эВ)

количество долин $M_L := 1$ $M_L := 4$

эффективные массы: Γ -долина $m_{c\Gamma} := 0.10 \cdot m_0$ $m_{d1\Gamma} := 0.11 \cdot m_0$ $m_{dr} := 0.28 \cdot m_0$

A-долина $m_{cL} := 0.46 \cdot m_0$ $m_{d1L} := 0.48 \cdot m_0$ $m_{dL} := 2.65 \cdot m_0$

Вводимые параметры: концентрация примеси (м-3) $N_d := 10^5$

температура решетки (К) $T_r := 300$

пределы изменения электронной температуры (К) $T_e := 300, 320 \dots 8000$

Д.2 Параметры InN. Гексагональна кристалічна решітка.

$$\begin{array}{llll}
 m_0 := 9.1 \cdot 10^{-31} & (\text{кг}) & k := 1.38 \cdot 10^{-23} & (\text{Дж/К}) & h := 1.055 \cdot 10^{-34} & (\text{Дж/с}) & \delta := 10^{-5} \\
 e := 1.6 \cdot 10^{-19} & (\text{Кл}) & \epsilon_0 := 8.842 \cdot 10^{-12} & (\text{Ф/м}) & a_0 := 0.53 \cdot 10^{-10} & (\text{м}) & \text{ORIGIN} := 0
 \end{array}$$

Параметры материала:

диэлектрич. прониксаемость: статическая $\epsilon_s := 15.3$ высокочаст. $\epsilon_v := 8.4$

средняя

$$\epsilon := 13$$

$$BC := \frac{1}{\epsilon_v} - \frac{1}{\epsilon_s}$$

плотность

$$\rho := 6.81 \cdot 10^3 \quad (\text{кг/м}^3)$$

скорость звука (продольна:)

$$v := 6.8 \cdot 10^3 \quad (\text{м/с})$$

акустический деформационный потенциал

$$Da := e \cdot 7.1 \quad (\text{эВ})$$

константа междолинной связи

$$D_M := e \cdot (11 \cdot 10^{10}) \quad (\text{эВ/м})$$

энергии оптич. фононов:

$$h\omega_0 := e \cdot 0.06 \quad (\text{эВ})$$

энергии междолинных фононов:

$$h\omega_M := e \cdot 0.06 \quad (\text{эВ})$$

междолинные расстояния

$$\Delta r_L := e \cdot 0.8$$

количество долин

$$M_r := 1$$

$$M_L := 4$$

эффективные массы: Г-долина

$$m_{cr} := 0.07 \cdot m_0$$

$$m_{d1r} := 0.08 \cdot m_0$$

$$m_{dr} := 0.20 \cdot m_0$$

А-долина

$$m_{cL} := 0.32 \cdot m_0$$

$$m_{d1L} := 0.36 \cdot m_0$$

$$m_{dL} := 2.65 \cdot m_0$$

Вводимые параметры: концентрация примеси (м-3)

$$N_d := 10^5$$

температура решетки (К)

$$T := 300$$

пределы изменения электронной температуры (К)

$$T_e := 300, 320 \dots 8000$$

Д.3 Параметры GaN. Кубична кристалічна решітка.

$$\begin{array}{llllll}
 m_0 := 9.1 \cdot 10^{-31} & (\text{кг}) & k := 1.38 \cdot 10^{-23} & (\text{Дж/К}) & h := 1.055 \cdot 10^{-34} & (\text{Дж/с}) & \delta := 10^{-5} \\
 e := 1.6 \cdot 10^{-19} & (\text{Кл}) & \epsilon_0 := 8.842 \cdot 10^{-12} & (\text{Ф/м}) & a_0 := 0.53 \cdot 10^{-10} & (\text{м}) & \text{ORIGIN} := 0
 \end{array}$$

Параметры материала:

диэлектрич. проницаемость: статическая $\epsilon_s := 9.6$ высокочаст. $\epsilon_v := 5.5$

средняя $\epsilon_{av} := 9$

$$BC := \frac{1}{\epsilon_v} - \frac{1}{\epsilon_s}$$

плотность $\rho := 6.15 \cdot 10^3$ (кг/м³)

скорость звука (продольна:) $v := 4.57 \cdot 10^3$ (м/с)

акустический деформационный потенциал $Da := e-8$ (эВ)

константа междолинной связи $Dm := e-11 \cdot 10^{10}$ (эВ/м)

энергии оптич. фононов: $\hbar\omega_0 := e-0.0603$ (эВ)

энергии междолинных фононов: $\hbar\omega_m := 0.05 \cdot e$ (эВ)

междолинные расстояния $\Delta r_L := e-1.6$ (эВ)

количество долин $M_r := 1$ $M_L := 3$

эффективные массы: Г-долина $m_{cr} := 0.14 \cdot m_0$ $m_{d1r} := 0.15 \cdot m_0$ $m_{dr} := 0.15 \cdot m_0$

X-долина(X!!!) $m_{cL} := 0.35 \cdot m_0$ $m_{d1L} := 0.41 \cdot m_0$ $m_{dL} := 2.21 \cdot m_0$

Вводимые параметры: концентрация примеси (м-3) $N_d := 10^5$

температура решетки (К) $T_r := 300$

пределы изменения электронной температуры (К) $T_e := 300, 320 \dots 15000$

Д.5 Параметры AlN. Кубична кристалічна решітка.

$$\begin{array}{llllll}
 m_0 := 9.1 \cdot 10^{-31} & (\text{кг}) & k := 1.38 \cdot 10^{-23} & (\text{Дж/К}) & h := 1.055 \cdot 10^{-34} & (\text{Дж/с}) & \delta := 10^{-5} \\
 e := 1.6 \cdot 10^{-19} & (\text{Кл}) & \epsilon_0 := 8.842 \cdot 10^{-12} & (\text{Ф/м}) & a_0 := 0.53 \cdot 10^{-10} & (\text{м}) & \text{ORIGIN} := 0
 \end{array}$$

Параметры материала:

диэлектрич. проницаемость: статическая	$\epsilon_c := 8.41$	высокочаст.	$\epsilon_v := 5.32$
средняя	$\epsilon_{\text{ср}} := 7.5$	$BC := \frac{1}{\epsilon_v} - \frac{1}{\epsilon_c}$	
плотность	$\rho := 3.255 \cdot 10^3$	(кг/м^3)	
скорость звука (продольная)	$v := 6.3 \cdot 10^3$	(м/с)	
акустический деформационный потенциал	$Da := e \cdot 9.5$	(эВ)	
константа междолинной связи	$D_M := e \cdot (8 \cdot 10^{10})$	(эВ/м)	
энергии оптич. фононов:	$\hbar\omega_o := e \cdot 0.06$	(эВ)	
энергии междолинных фононов:	$\hbar\omega_M := e \cdot 0.05$	(эВ)	
междолинные расстояния	$\Delta r_L := e \cdot 1.1$	(эВ)	
количество долин	$M_r := 1$	$M_L := 4$	
эффективные массы: Г-долина	$m_{cr} := 0.42 \cdot m_0$	$m_{dlr} := 0.45 \cdot m_0$	$m_{dr} := 0.6 \cdot m_0$
ML-долина	$m_{cL} := 0.52 \cdot m_0$	$m_{dlL} := 0.54 \cdot m_0$	$m_{dL} := 3.26 \cdot m_0$
X-долина	$m_{cx} := 0.48 \cdot m_0$	$m_{dlx} := 0.7 \cdot m_0$	$m_{dx} := 1.1 \cdot m_0$
Вводимые параметры: концентрация примеси (м-3)		$N_d := 10^5$	
температура решетки (К)		$T_{\text{ср}} := 300$	
пределы изменения электронной температуры (К)		$T_e := 300, 320 \dots 20000$	

Д.6 Параметры AlN. Гексагональная кристаллическая решетка.

$$\begin{array}{llllll}
 m_0 := 9.1 \cdot 10^{-31} & (\text{кг}) & k := 1.38 \cdot 10^{-23} & (\text{Дж/К}) & h := 1.055 \cdot 10^{-34} & (\text{Дж/с}) & \delta := 10^{-5} \\
 e := 1.6 \cdot 10^{-19} & (\text{Кл}) & \epsilon_0 := 8.842 \cdot 10^{-12} & (\text{Ф/м}) & a_0 := 0.35 \cdot 10^{-10} & (\text{м}) & \text{ORIGIN} := 0
 \end{array}$$

Параметры материала:

диэлектрич. проницаемость: статическая $\epsilon_s := 9.14$ высокочаст. $\epsilon_v := 4.84$

средняя $\epsilon_{av} := 6.5$

$$BC := \frac{1}{\epsilon_v} - \frac{1}{\epsilon_s}$$

плотность $\rho := 3.255 \cdot 10^3$ (кг/м³)

скорость звука (продольная): $v := 6.3 \cdot 10^3$ (м/с)

акустический деформационный потенциал $Da := e \cdot 9.5$ (эВ)

константа междолинной связи $D_M := e \cdot (7 \cdot 10^{10})$ (эВ/м)

энергии оптич. фононов:

$\hbar\omega_0 := e \cdot 0.06$ (эВ)

энергии междолинных фононов:

$\hbar\omega_M := e \cdot 0.05$ (эВ)

междолинные расстояния $\Delta r_L := e \cdot 0.7$ (эВ)

количество долин $M_r := 1$ $M_L := 4$

эффективные массы: Г-долина $m_{cr} := 0.35 \cdot m_0$ $m_{dlr} := 0.4 \cdot m_0$ $m_{dr} := 0.6 \cdot m_0$

ML-долина $m_{cL} := 0.45 \cdot m_0$ $m_{dlL} := 0.45 \cdot m_0$ $m_{dL} := 3.26 \cdot m_0$

X-долина $m_{cx} := 0.48 \cdot m_0$ $m_{dlx} := 0.7 \cdot m_0$ $m_{dx} := 1.1 \cdot m_0$

Вводимые параметры: концентрация примеси (м-3) $N_d := 10^5$

температура решетки (К) $T_r := 300$

пределы изменения электронной температуры (К) $T_e := 300, 320 \dots 20000$

Д.7 Уніфікований модуль модельних розрахунків III-нітридів

$$nu(Te) := \frac{[12 \cdot \varepsilon_0 \cdot \varepsilon \cdot mdr \cdot (k \cdot Te)^2]}{h^2 \cdot e^2 \cdot Nd}$$

$$\lambda Ndr(Te) := \sqrt{\frac{8\pi}{mdr}} \cdot \left(\frac{e^2}{4 \cdot \varepsilon \cdot \varepsilon_0} \right)^2 \left(\ln(1 + nu(Te)) - \frac{nu(Te)}{1 + nu(Te)} \right) \cdot Nd \cdot (k \cdot Te)^{-1.5}$$

$$\tau Ndr(Te) := \frac{1}{\lambda Ndr(Te)}$$

примесное L

$$\underline{nu}(Te) := \frac{[12 \cdot \varepsilon_0 \cdot \varepsilon \cdot mdL \cdot (k \cdot Te)^2]}{h^2 \cdot e^2 \cdot Nd}$$

$$\lambda NdL(Te) := \sqrt{\frac{8\pi}{mdL}} \cdot \left(\frac{e^2}{4 \cdot \varepsilon \cdot \varepsilon_0} \right)^2 \left(\ln(1 + nu(Te)) - \frac{nu(Te)}{1 + nu(Te)} \right) \cdot Nd \cdot (k \cdot Te)^{-1.5}$$

$$\tau NdL(Te) := \frac{1}{\lambda NdL(Te)}$$

Акустическое Г

$$Aar(Te) := \frac{\sqrt{3 \cdot \pi} \cdot (mdr)^{1.5} \cdot Da^2 \cdot k \cdot T \cdot \sqrt{k \cdot Te}}{\pi \cdot h^4 \cdot \rho \cdot v^2}$$

$$\lambda ar(Te) := \frac{3 \cdot Aar(Te)}{4}$$

$$\tau ar(Te) := \frac{1}{\lambda ar(Te)}$$

Акустическое L

$$AaL(Te) := \frac{\sqrt{3 \cdot \pi} \cdot (mdL)^{1.5} \cdot Da^2 \cdot k \cdot T \cdot \sqrt{k \cdot Te}}{\pi \cdot h^4 \cdot \rho \cdot v^2}$$

$$\lambda aL(Te) := \frac{3 \cdot AaL(Te)}{4}$$

$$\tau aL(Te) := \frac{1}{\lambda aL(Te)}$$

$$\Theta := \frac{h\omega_0}{k} \quad z := \frac{\Theta}{2 \cdot T} \quad \lambda(Te) := \frac{T}{Te}$$

$$t := \frac{h\omega_0}{2 \cdot k \cdot T}$$

$$te(Te) := \frac{h\omega_0}{2 \cdot k \cdot Te}$$

$$E0r := \frac{(|e| \cdot mdr \cdot k \cdot \Theta) \cdot BC}{4\pi \cdot \varepsilon_0 \cdot h^2}$$

$$E0L := \frac{(|e| \cdot mdL \cdot k \cdot \Theta) \cdot BC}{4\pi \cdot \varepsilon_0 \cdot h^2}$$

Полярное оптическое Г

$$\alpha_{\Gamma} := \frac{e^2 \cdot \sqrt{m_{\text{dr}}} \cdot (\text{BC})}{4 \cdot \sqrt{2} \cdot \pi \cdot \varepsilon_0 \cdot h \cdot h\omega_0^{0.5}}$$

$$\lambda_{\text{or}}(\text{Te}) := \alpha_{\Gamma} \cdot \frac{2 \cdot h\omega_0}{h} \cdot \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot \frac{\cosh(t - \text{te}(\text{Te}) + \delta)}{\sinh(t)} \cdot \text{te}(\text{Te})^{0.5} \cdot K_0(\text{te}(\text{Te}))$$

$$\lambda_{\text{oL}}(\text{Te}) := \alpha_{\text{L}} \cdot \frac{2 \cdot h\omega_0}{h} \cdot \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot \frac{\cosh(t - \text{te}(\text{Te}) + \delta)}{\sinh(t)} \cdot \text{te}(\text{Te})^{0.5} \cdot K_0(\text{te}(\text{Te}))$$

$$\tau_{\text{or}}(\text{Te}) := \frac{1}{\lambda_{\text{or}}(\text{Te})}$$

$$\tau_{\text{oL}}(\text{Te}) := \frac{1}{\lambda_{\text{oL}}(\text{Te})}$$

Междолинное ГL

$$t_{\text{L}} := \frac{h\omega_{\text{M}}}{2 \cdot k \cdot T}$$

$$\text{teL}(\text{Te}) := \frac{h\omega_{\text{M}}}{2 \cdot k \cdot \text{Te}}$$

$$\Delta_{\text{rL}}(\text{Te}) := \frac{\Delta_{\text{rL}}}{k \cdot \text{Te}}$$

$$\Delta_{\text{Lr}}(\text{Te}) := \frac{-\Delta_{\text{rL}}}{k \cdot \text{Te}}$$

$$A_{\text{o}} := \frac{m_{\text{dr}}^{1.5}}{\pi^{1.5} \cdot \rho \cdot h^2} \cdot \frac{(D_{\text{M}})^2}{\sqrt{h\omega_{\text{M}}}} \quad A_{\text{rL}} := \frac{A_{\text{o}}}{2} \cdot \left(\frac{m_{\text{dL}}}{m_{\text{dr}}} \right)^{1.5}$$

$$\lambda_{\text{rL}}(\text{Te}) := A_{\text{rL}} \cdot \cosh(t_{\text{L}} - \text{teL}(\text{Te}) + \delta) \cdot \text{csch}(t_{\text{L}}) \cdot \text{teL}(\text{Te})^{-0.5} \cdot \Delta_{\text{rL}}(\text{Te}) \cdot \exp[-(0.5) \cdot \Delta_{\text{rL}}(\text{Te})] \cdot K_1(0.5 \cdot \Delta_{\text{rL}}(\text{Te}))$$

$$A_{\text{a}} := \frac{0.75 \cdot \sqrt{3} \cdot \pi \cdot m_{\text{dL}}^{1.5} \cdot \text{Da}^2}{\pi \cdot h^4 \cdot \rho \cdot v^2} \cdot k^{1.5}$$

$$\underline{A_{\text{o}}} := \frac{m_{\text{dL}}^{1.5}}{\pi^{1.5} \cdot \rho \cdot h^2} \cdot \frac{(D_{\text{M}})^2}{\sqrt{h\omega_0}} \quad \alpha := \frac{e^2 \cdot m_{\text{dL}}^{0.5}}{4 \cdot 2^{0.5} \cdot \pi \cdot \varepsilon_0 \cdot h \cdot h\omega_0^{0.5}} \cdot (\text{BC}) \quad A_{\text{Lr}} := \frac{A_{\text{o}}}{2} \cdot \left(\frac{m_{\text{dLr}}}{m_{\text{dL}}} \right)^{1.5}$$

$$\lambda_{\text{Lr}}(\text{Te}) := A_{\text{Lr}} \cdot \cosh(t_{\text{L}} - \text{teL}(\text{Te}) + \delta) \cdot \text{csch}(t_{\text{L}}) \cdot \text{teL}(\text{Te})^{-0.5} \cdot \Delta_{\text{rL}}(\text{Te}) \cdot \exp[(0.5) \cdot \Delta_{\text{rL}}(\text{Te})] \cdot K_1(0.5 \cdot \Delta_{\text{rL}}(\text{Te}))$$

$$\tau_{\text{mL}}(\text{Te}) := \frac{1}{\lambda_{\text{rL}}(\text{Te})}$$

$$A_{\text{oe}} := A_{\text{o}} \cdot (\text{ML} - 1)$$

$$\lambda_{\text{o}}(\text{Te}) := A_{\text{oe}} \cdot \text{csch}(t) \cdot \sqrt{\text{te}(\text{Te})} \cdot \cosh(t - \text{te}(\text{Te})) \cdot K_1(\text{te}(\text{Te}))$$

Суммарное рассеивание Г,L

$$\lambda_{\text{r}}(\text{Te}) := \lambda_{\text{ar}}(\text{Te}) + \lambda_{\text{or}}(\text{Te}) + \lambda_{\text{Ndr}}(\text{Te}) + \lambda_{\text{rL}}(\text{Te})$$

$$\tau_{\text{r}}(\text{Te}) := \frac{1}{\lambda_{\text{r}}(\text{Te})}$$

$$\lambda_{\text{L}}(\text{Te}) := \lambda_{\text{aL}}(\text{Te}) + \lambda_{\text{oL}}(\text{Te}) + \lambda_{\text{NdL}}(\text{Te}) + \lambda_{\text{Lr}}(\text{Te}) + \lambda_{\text{o}}(\text{Te})$$

$$\tau_{\text{L}}(\text{Te}) := \frac{1}{\lambda_{\text{L}}(\text{Te})}$$

$$t := \frac{(\hbar\omega_0)}{2 \cdot k \cdot T} \quad t_M := \frac{(\hbar\omega_M)}{2 \cdot k \cdot T}$$

$$te(Te) := \frac{(\hbar\omega_0)}{2 \cdot k \cdot Te} \quad tem(Te) := \frac{(\hbar\omega_M)}{2 \cdot k \cdot Te}$$

$$\gamma_o(Te) := \left(\frac{3}{4}\right) \cdot \frac{(t - te(Te) + \delta)}{t \cdot te(Te) \cdot \tanh(t - te(Te) + \delta)} \quad \nu_o(Te) := \frac{\lambda_o(Te)}{\gamma_o(Te)}$$

Определение гамма Г

Определение гамма L

гамма для каждого вида рассеяния

$$\gamma_{ar} := \frac{k \cdot T}{v^2 \cdot 4 \cdot m_{cr}}$$

$$\gamma_{aL} := \frac{k \cdot T}{v^2 \cdot 4 \cdot m_{cL}}$$

$$\gamma_{or}(Te) := \left(\frac{3}{4}\right) \cdot \frac{(t - te(Te) + \delta)}{t \cdot te(Te) \cdot \tanh(t - te(Te) + \delta)}$$

$$\gamma_{oL}(Te) := \left(\frac{3}{4}\right) \cdot \frac{(t - te(Te) + \delta)}{t \cdot te(Te) \cdot \tanh(t - te(Te) + \delta)}$$

$$\gamma_{rL}(Te) := \left(\frac{3}{4}\right) \cdot \frac{(tm - tem(Te) + \delta)}{tm \cdot tem(Te) \cdot \tanh(tm - tem(Te) + \delta)}$$

$$\gamma_{Lr}(Te) := \left(\frac{3}{4}\right) \cdot \frac{(tm - tem(Te) + \delta)}{tm \cdot tem(Te) \cdot \tanh(tm - tem(Te) + \delta)}$$

$$\nu_{ar}(Te) := \frac{\lambda_{ar}(Te)}{\gamma_{ar}}$$

$$\nu_{aL}(Te) := \frac{\lambda_{aL}(Te)}{\gamma_{aL}}$$

$$\nu_{or}(Te) := \frac{\lambda_{or}(Te)}{\gamma_{or}(Te)}$$

$$\nu_{oL}(Te) := \frac{\lambda_{oL}(Te)}{\gamma_{oL}(Te)}$$

$$\nu_{rL}(Te) := \frac{\lambda_{rL}(Te)}{\gamma_{rL}(Te)}$$

$$\nu_{Lr}(Te) := \frac{\lambda_{Lr}(Te)}{\gamma_{Lr}(Te)}$$

$$\nu_{sumr}(Te) := \nu_{ar}(Te) + \nu_{or}(Te) + \nu_{rL}(Te)$$

$$\nu_{sumL}(Te) := \nu_{aL}(Te) + \nu_{oL}(Te) + \nu_{Lr}(Te) + \nu_o(Te)$$

$$\gamma_r(Te) := \frac{\lambda_r(Te)}{\nu_{sumr}(Te)}$$

$$\gamma_L(Te) := \frac{\lambda_L(Te)}{\nu_{sumL}(Te)}$$

$$\tau_{EG}(Te) := \nu_{sumr}(Te)^{(-1)} \cdot 10^{12}$$

Определение подвижности

$$\mu_r(Te) := e \cdot \frac{\tau_r(Te)}{m_{cr}} \quad \mu_L(Te) := e \cdot \frac{\tau_L(Te)}{m_{cL}}$$

Весовые коэфф.
~Te2

$$\text{tesla} := 300$$

$$\beta_1 := 2 \gamma r(4000) \cdot \frac{300}{4000}$$

$$a(\text{Te}) := \frac{\mu L(300)^2 \cdot m_{cL}}{\mu r(\text{Te})^2 m_{cr} \cdot \beta_1}$$

$$\beta_2 := 2 \gamma L(4000) \cdot \frac{300}{4000}$$

$$\text{Te2}(\text{Te}) := \text{tesla} \cdot \frac{1 - a(\text{Te})}{1 - a(\text{Te}) \cdot \beta_2}$$

$$nL(\text{Te}) := \left(\frac{m_{dL}}{m_{dr}} \right)^{1.5} \cdot 1 \cdot \exp[-(\Delta_{rL}(\text{Te})) - tL]$$

$$F_{ptr}(\text{Te}) := \cosh(tL - teL(\text{Te}))$$

$$br(\text{Te}) := \frac{1}{1 + nL(\text{Te})} \quad bL(\text{Te}) := 1 - br(\text{Te})$$

Энергия

$$Dr(\text{Te}) := br(\text{Te}) \cdot \mu r(\text{Te})^2 \cdot m_{cr} \cdot 1.0 \cdot (2 \cdot \gamma r(\text{Te}) - 1)$$

$$DL(\text{Te}) := bL(\text{Te}) \cdot \mu L(\text{Te})^2 \cdot 1.0 \cdot m_{cL} \cdot (2 \cdot \gamma L(\text{Te}) - 1)$$

$$m_{cp}(\text{Te}) := \frac{1}{\frac{br(\text{Te})}{m_{cr}} + \frac{bL(\text{Te})}{m_{cL}}}$$

$$Er(\text{Te}) := \sqrt{\frac{3 \cdot k \cdot (\text{Te} - T + \delta)}{Dr(\text{Te})}} \cdot 10^{-5}$$

$$EL(\text{Te}) := \sqrt{\frac{3 \cdot k \cdot (\text{Te} - T + \delta)}{DL(\text{Te})}} \cdot 10^{-5}$$

$$\mu(\text{Te}) := br(\text{Te}) \cdot \mu r(\text{Te}) + bL(\text{Te}) \cdot \mu L(\text{Te})$$

$$E(\text{Te}) := \sqrt{\frac{3 \cdot k \cdot (\text{Te} - T + \delta)}{Dr(\text{Te}) + DL(\text{Te})}} \cdot 10^{-5}$$

$$vr(\text{Te}) := \mu r(\text{Te}) \cdot Er(\text{Te})$$

$$vL(\text{Te}) := \mu L(\text{Te}) \cdot EL(\text{Te})$$

Дрейфовая скорость в долинах

$$T_{dp}(\text{Te}) := (m_{cp}(\text{Te})) \cdot \frac{v(\text{Te})^2 \cdot 10^{11}}{3 \cdot k}$$

$$\tau_p(\text{Te}) := 10^{12} \cdot \left(\frac{\mu(\text{Te}) \cdot m_{cp}(\text{Te})}{e} \right)$$

$$\tau_E(\text{Te}) := \frac{\tau_p(\text{Te})}{2} + \frac{3 \cdot k \cdot (\text{Te} - T + \delta) \cdot 10^2}{2 \cdot e \cdot \mu(\text{Te}) \cdot (E(\text{Te}))^2}$$

$$\lambda_M(\text{Te}) := \lambda_{rL}(\text{Te}) + \lambda_{Lr}(\text{Te})$$

$$\tau_M(\text{Te}) := \frac{10^{12}}{\lambda_M(\text{Te})}$$

$$\underline{\underline{t}} := 0, 0.001.. 1$$

$$\beta := 0 \times 10^{-3}$$

$$A(\text{Te}, \text{br}) := \beta \cdot 2 \cdot (\Delta r_L - h\omega_0) \cdot \text{br} \cdot \lambda r_L(\text{Te}) \cdot \left[\nu r(\text{Te})^{(-1)} - \nu x(\text{Te})^{(-1)} \right] \quad \underline{\underline{A}} := 0$$

$$\underline{\underline{Dr}}(\text{Te}) := \text{br}(\text{Te}) \cdot \mu r(\text{Te})^2 \cdot m_{cr} \cdot 1.0 \cdot (2 \cdot \gamma r(\text{Te}) - 1)$$

$$\underline{\underline{DL}}(\text{Te}) := (1 - \text{br}(\text{Te})) \cdot \mu L(\text{Te})^2 \cdot 1.0 \cdot m_{cL} \cdot (2 \cdot \gamma L(\text{Te}) - 1)$$

$$\underline{\underline{E}}(\text{Te}) := \sqrt{\frac{3 \cdot k \cdot (\text{Te} - T + \delta) - A}{Dr(\text{Te}) + DL(\text{Te})}} \cdot 10^{-5}$$

$$m\alpha(\text{Te}) := \left[\frac{\text{br}(\text{Te})}{m_{cr}} + \left(\frac{1 - \text{br}(\text{Te})}{m_{cL}} \right) \right]^{-1}$$

$$\underline{\underline{\mu}}(\text{Te}) := \text{br}(\text{Te}) \cdot \mu r(\text{Te}) + (1 - \text{br}(\text{Te})) \cdot \mu L(\text{Te})$$

$$\underline{\underline{\tau_p}}(\text{Te}) := 10^{12} \cdot \frac{\mu(\text{Te}) \cdot m\alpha(\text{Te})}{e}$$

$$\underline{\underline{\tau_E}}(\text{Te}) := \frac{\tau_p(\text{Te})}{2} + \frac{3 \cdot k \cdot (\text{Te} - T + \delta) \cdot 10^2}{2 \cdot e \cdot \mu(\text{Te}) \cdot E(\text{Te})^2}$$

$$\text{length_imp} := 8$$

$$\text{start_t} := 0$$

$$\text{end_t} := 3$$

$$\text{front_t} := 10^{-9}$$

$$t := -1, -0.99.. \text{end_t}$$

$$\text{Amp} := 260$$

$$\begin{aligned} E(t) := & \text{Amp} \cdot [\Phi[t - (\text{start_t} + \text{front_t})] - \Phi[t - (\text{start_t} + \text{length_imp} - \text{front_t})]] \dots \\ & + [\Phi[t - \text{start_t}] - \Phi[t - (\text{start_t} + \text{front_t})]] \cdot (\text{Amp} \cdot 10 \cdot t - \text{Amp} \cdot 10 \cdot \text{start_t}) \dots \\ & + [\Phi[t - (\text{start_t} + \text{length_imp} - \text{front_t})] - \Phi[t - (\text{start_t} + \text{length_imp})]] \dots \\ & + [-\text{Amp} \cdot 10 \cdot t + \text{Amp} \cdot 10 \cdot (\text{start_t} + \text{length_imp})] + 2 \end{aligned}$$

$$\underline{\underline{S0}} \quad \text{время}$$

$$\underline{\underline{S1}} \quad y0 \quad \underline{\underline{Te}}$$

$$\underline{\underline{S2}} \quad y1 \quad \underline{\underline{Vдр}}$$

$$\underline{\underline{S3}} \quad y2 \quad \underline{\underline{br}}$$

$$DY(t, y) := \begin{bmatrix} -\frac{(y_0 - T + \delta)}{\tau_E(y_0)} + \frac{(y_1)^2 \cdot m\alpha(y_0) \cdot 10^{10}}{1 \tau_E(y_0) \cdot 3 \cdot k} \cdot \left(\frac{2 \tau_E(y_0)}{\tau_p(y_0)} - 1 \right) \\ \frac{e}{m\alpha(y_0)} \cdot E(t) \cdot 10^{-12} - \frac{y_1}{\tau_p(y_0)} \\ \left[-\text{br}(y_0) \cdot \lambda r_L(y_0) + (1 - \text{br}(y_0)) \cdot \lambda r_L(y_0) \right] \cdot 10^{-12} \end{bmatrix}$$

$$\text{to4ek} := 2^{11} - 1$$

$$S := \text{Rkadapt}(Y0, 0, 1, \text{to4ek}, DY)$$

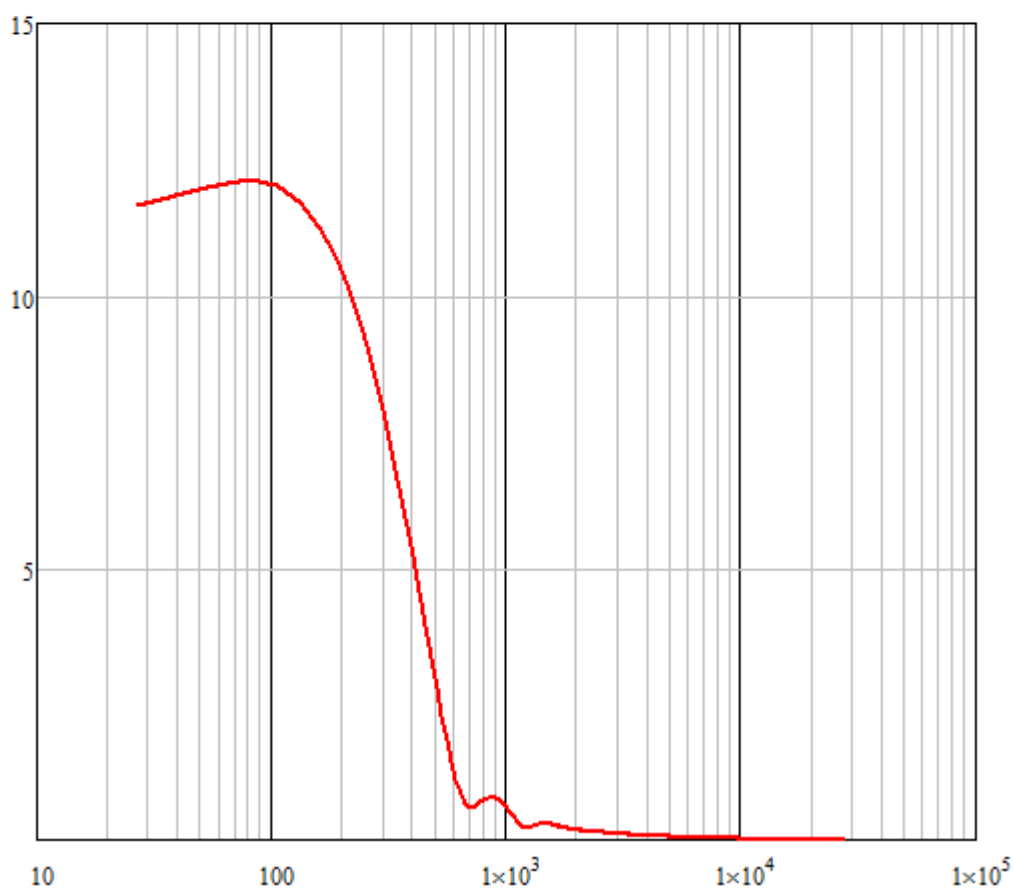
$$L := 1, 2 \dots \text{to4ek}$$

$$\text{sum}(L) := \frac{\sum_{k=1}^L (S_{k,2})}{(L)^{-1}}$$

$$i := 1, 2 \dots \text{to4ek}$$

$$D_i := S_{i,2} \quad Fu := \text{fft}(D)$$

$$fn_i := \frac{\frac{i}{2}}{\text{end_t} \cdot 10^{-12}}$$



ДОДАТОК. АКТ ВПРОВАДЖЕННЯ.


 З А Т В Е Р Д Ж У Ю
 Перший проректор
 Національного технічного університету України
 «Київський політехнічний інститут імені Ігоря
 Сікорського»
 Ю.І. Якименко
 " 25 " березня 2019 р.

АКТ ВПРОВАДЖЕННЯ

результатів дисертаційної роботи в навчальний процес

Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»

Ми, що нижче підписалися, декан факультету електроніки Жуйков В.Я. та завідувач кафедри електронної інженерії Тимофєєв В.І., склали даний акт про те, що результати дисертаційної роботи Кулікова Костянтина Вячеславовича «Метод моделювання імпульсних та частотних характеристик III-нітридів» використовуються у навчальному процесі Національного технічного університету України «Київський Політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського» факультету електроніки на кафедрі електронної інженерії за спеціальністю 153 «Мікро- та наносистемна техніка».

Вид результату, що впроваджується	Форма впровадження	Ефект від впровадження
1. Математичні моделі та результати моделювання використано для аналізу особливостей процесів переносу у сильному електричному полі.	У навчальних програмах дисципліни «Фізика електронних процесів» (розділ «Процеси у сильних електричних полях») для підготовки бакалаврів зі спеціальності 153 «Мікро- та наносистемна техніка».	Удосконалення навчальних програм підготовки бакалаврів та магістрів
2. Розроблені програми моделювання електронного транспорту використано для дослідження динамічних електронних процесів та порівняння властивостей сучасних напівпровідникових матеріалів	У навчальних програмах дисциплін «Моделювання мікро- та наноелектронних компонентів» (Розділ 1 «Методи моделювання динамічних електронних процесів» та розділ 2 «Електронні властивості напівпровідникових матеріалів») для підготовки магістрів зі спеціальності 153 «Мікро- та наносистемна техніка». У лабораторному практикумі з цієї ж дисципліни створено програмне забезпечення для дослідження динамічних властивостей напівпровідникових матеріалів	Підвищення якості практичної підготовки бакалаврів та магістрів

Декан факультету
електроніки

В.Я. Жуйков

Завідувач кафедри електронної
інженерії

В.І. Тимофєєв

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

- [1] Куликов К. В., Москалюк В. А., Ханжиев Д. С. Насыщение дрейфовой скорости и упругость рассеяния. К.: Н.-техн. сб. «Электроника и связь», 2001. т. 11. с.100–104.
URL: http://old.elc.kpi.ua/images/pdf/soderjanie/Soderjanie_11.pdf
(дата звернення 16.12.2020)
- [2] Куликов К. В., Москалюк В. А. Высокочастотная проводимость GaAs. К.: Н.-техн. сб. «Электроника и связь», 2002. т. 17, с.40-43
URL: http://old.elc.kpi.ua/images/pdf/soderjanie/Soderjanie_17.pdf
(дата звернення 16.12.2020)
- [3] Куликов К. В., Москалюк В. А. Импульсная проводимость GaAs в сильном электрическом поле. К.: Вісник Державного університету інформаційно-комунікаційних технологій, 2005. т. 3, № 3-4, с.169-172.
- [4] Куликов К. В. Переходные процессы в GaAs в сильном электрическом поле. К.: Н.-техн. сб. «Электроника и связь», тематический выпуск «Проблемы электроники», 2006. с.31-34.
- [5] Куликов К. В., Москалюк В. А. Частотные свойства GaN в сильном электрическом поле. К.: Н.-техн. сб. «Электроника и связь», тематический выпуск «Проблемы электроники», 2007. с.38-40.
- [6] Куликов К. В., Москалюк В. А. Механизмы рассеяния и параметры нитрида галлия. К.: Н.-техн. сб. «Электроника и связь», тематический выпуск «Проблемы электроники», 2008. т. 1-2, № 1, с.10-13.
URL: [http://old.elc.kpi.ua/images/pdf/Arhiv%201/Elc%20\(42-43\)%201-2%202008.pdf](http://old.elc.kpi.ua/images/pdf/Arhiv%201/Elc%20(42-43)%201-2%202008.pdf) (дата звернення 16.12.2020)
- [7] Куликов К. В., Москалюк В. А. Высокочастотные параметры нитрида галлия. К.: Техника и приборы СВЧ, 2008. т. 2. с.48-52.
URL: http://www.tkea.com.ua/svc/2008/2_2008/st_11.htm (дата звернення 16.12.2020)
- [8] Куликов К. В., Москалюк В. А. Частотные параметры нитрида галлия в сильных полях. К.: Вісник Державного університету інформаційно-комунікаційних технологій, 2009. т. 7, № 3, с.306-309.
- [9] Куликов К. В., Москалюк В. А. Всплеск дрейфовой скорости в нитриде галлия. К.: Н.-техн. сб. «Электроника и связь», 2009. т. 4-5, с.28-31.
URL: http://journals.kpi.ua/publications/text/2009_2_28_31.pdf (дата звернення 16.12.2020)

- [10] Baida I., Kulikov K., Moskaliuk V., V. Timofeyev V. Aspects of Intervalley Scattering Simulation Considering Short-wavelength Phonons. 2018 International Conference on Information and Telecommunication Technologies and Radio Electronics (UkrMiCo), Odessa, Ukraine, 2018. pp. 1-4.
DOI: 10.1109/UkrMiCo43733.2018.9047529
ISBN: 9781538652640
- [11] Байда І. П., Куліков К. В., Москалюк В. О., Тимофєєв В. І.. Релаксаційні процеси у субмікронних гетеротранзисторах з системою квантових ям. К.: Мікросистеми, Електроніка та Акустика (ISSN 2523-4455), 2019. т. 24. № 2. с.14-24.
DOI: 10.20535/2523-4455.2019.24.2.169269
- [12] Куліков К. В., Москалюк В. О., Тимофєєв В. О. Високочастотні властивості GaN, AlN та InN. К.: Мікросистеми, Електроніка та Акустика (ISSN 2523-4455), 2019. т. 24. № 3. с.20-32.
DOI: 10.20535/2523-4455.2019.24.3.178841
- [13] Kulikov K., Moskaliuk V., Timofeyev V. Electron transport in quantum well heterotransistors., Svishtov, Bulgaria, SworldJournal, 2020, issue №6., part 6, pp. 14–25.
DOI: 10.30888/2663-5712.2020-06-06-137
- [14] Куликов К. В., Москалюк В. А. Аналитический метод расчета времен релаксации в 2D полупроводниковых структурах. Ів.-Франк.: Матеріали ІХ міжнар. конф. «Фізика і технологія тонких плівок», 2003. т. 1, с.93-94.
- [15] Куликов К. В., Москалюк В. А. Времена релаксации и высокочастотная проводимость GaAs. Севастополь: Материалы 13-й межд. конф. «СВЧ-техника и телекомм. технологии» (КрыМиКо'2003), 2003. с.491-492
DOI: 10.1109/CRMICO.2003.158908
- [16] Куликов К. В., Москалюк В. А. Пикосекундная релаксация в GaAs. Севастополь: 16-я межд. конф. «СВЧ-техника и телекомм. технологии», Севастополь: Вебер, 2006. с.633-634.
DOI: 10.1109/CRMICO.2006.256136
- [17] Bayda I., Kulikov K., Moskaliuk V. Electron heating during intervalley scattering. 2016 IEEE 36th International Conference on Electronics and Nanotechnology (ELNANO), Kyiv, Ukraine, 2016. pp.17-20.
DOI: 10.1109/ELNANO.2016.7493000
- [18] Kulikov K., Baida I., Moskaliuk V., Timofeyev V. Conductance Cutoff of A3B5 Nitrides at High-Frequency Region. 2018 IEEE 38th International Conference on Electronics and Nanotechnology (ELNANO), Kyiv, Ukraine, 2018. pp.101-105.
DOI: 10.1109/ELNANO.2018.8477497

- [19] Kulikov K., Moskaliuk V., Timofeyev V. Modeling Conductance Cutoff of GaN, AlN and InN at High-frequency Region. 2019 IEEE 39th International Conference on Electronics and Nanotechnology (ELNANO), Kyiv, Ukraine, 2019. pp.191-196.
DOI: 10.1109/ELNANO.2019.8783773
- [20] Куликов К. В., Москалюк В. А., Тимофеев В. И. Нитрид галлия: оценка частотных свойств в сильном поле. К.: Тези II Міжнародна науково-технічна конференція «Сучасні інформаційно-комунікаційні технології» COMINFO'2006, 2006.
- [21] Куликов К. В., Москалюк В. А. Частотные свойства нитрида галлия в сильном электрическом поле. К.: Тези доп. міжн. н.-техн. конф. «Сучасні інформаційно-комунікаційні технології» COMINFO'2008, 2008. с. 108.
- [22] Kulikov K., Moskaliuk V., Timofeev V. High-frequency conductance cutoff of gallium nitride. 2017 IEEE International conference of information-telecommunication technologies and radio electronics (UkrMiCo'2017)/ Materials of scientific and technical conference, Odessa, Ukraine, 2017. pp.317-319.
DOI: 10.1109/UkrMiCo42337.2017
- [23] Siddiqua P., Yana Wang, Shur M. S., O'Leary S. K. Empirical model for the velocity-field characteristics of semiconductors exhibiting negative differential mobility. Solid State Communications, 2019. v. 299. p. 113658.
DOI: 10.1016/j.ssc.2019.113658
- [24] Смолин В. К., Высокочастотная микроэлектроника на структурах с кремниевыми подложками. М. : Нано- и микросистемная техника, 2016. т. 18, № 11. с. 713-720.
URL: <http://www.microsystems.ru/files/full/mc201611.pdf> (дата звернення 16.12.2020)
- [25] Encomendero J., Jena D., Xing H. G., Resonant Tunneling Transport in Polar III-Nitride Heterostructures. Springer International Publishing. 2020.
URL: <https://www.springerprofessional.de/en/resonant-tunneling-transport-in-polar-iii-nitride-heterostructur/17027464> (дата звернення 16.12.2020)
- [26] Guo W., Zhang M., Bhattacharya P., Heo J. Auger recombination in III-nitride nanowires and its effect on nanowire light-emitting diode characteristics. *Nano Lett.* 11(4), 2011. p. 1434
DOI: 10.1021/NL103649D
- [27] Arafin S., Liu X., Mi Z. Review of recent progress of III-nitride nanowire lasers. *J. Nanophotonics* 7(1), 2013. p. 074599
DOI: 10.1117/1.JNP.7.074599
- [28] Saxena D., Mokkapati S., Jagadish C. Semiconductor nanolasers. *IEEE Photonics J* 4(2), 2012. p. 582
DOI: 10.1109/JPHOT.2012.2189201

- [29] Maekawa T., Kanaya H., Suzuki S., Asada M. Oscillation up to 1.92 THz in resonant tunneling diode by reduced conduction loss. *Appl. Phys. Express* 9, 2016. p. 024101
DOI: 10.7567/APEX.9.024101
- [30] Oshima N., Hashimoto K., Suzuki S., Asada M. Wireless data transmission of 34 Gbit/s at a 500-GHz range using resonant-tunnelling-diode terahertz oscillator. *Electron. Lett.* 52(1), 2016. pp. 1897–1898
DOI: 10.1049/el.2016.3120
- [31] Asada M., Suzuki S. Room-temperature oscillation of resonant tunneling diodes close to 2 THz and their functions for various applications. *J. Infrared Millimeter Terahertz Waves* 37, 2016. pp. 1185–1198
DOI: 10.1007/s10762-016-0321-6
- [32] Ohta H., Okamoto K. Nonpolar/semipolar GaN technology for violet, blue, and green laser diodes. *MRS Bulletin* 34(5), 2009. p. 324
DOI: 10.1557/mrs2009.94
- [33] Morkoç H., Handbook of Nitride Semiconductors and Devices, Vol. 1, Wiley, Weinheim, 2008. p. 1257
DOI: 10.1002/9783527628438
- [34] H. Morkoç. Handbook of Nitride Semiconductors and Devices, Vol. 2, Wiley, Weinheim, 2008. p. 847
DOI: 10.1002/9783527628414
- [35] H. Morkoç. Handbook of Nitride Semiconductors and Devices, Vol. 3, Wiley, Weinheim, 2008. p. 847
DOI: 10.1002/9783527628445
- [36] Adachi Sadao. Properties of Semiconductor Alloys: Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors, West Sussex, United Kingdom: John Wiley & Sons Ltd, 2009. p. 400.
DOI: 10.1002/9780470744383
- [37] Shur M. Wide band gap semiconductor technology: State-of-the-art. *Solid-State Electronics (ISSN 0038-1101)*, v. 155, 2019. pp. 65-75
DOI: 10.1016/j.sse.2019.03.020
- [38] Belkin M., Capasso F. New frontiers in quantum cascade lasers: high performance room temperature terahertz sources. *Phys. Scr.* 90, 2015. p. 118002
DOI: 10.1088/0031-8949/90/11/118002
- [39] Avrutin V., Silversmith D., Mori Y., Kawamura F., Kitaoka Y., Morkoc H. Growth of bulk GaN and AlN: Progress and challenges, *Proc. IEEE* 98(7), 2010. p. 1302
DOI: 10.1109/JPROC.2010.2044967
- [40] Paskova T., Hanser D., Evans K. GaN substrates for III-nitride devices. *Proc. IEEE* 98(7), 2010. pp. 1324–1338
DOI: 10.1109/JPROC.2009.2030699

- [41] Moskaliuk, V., Timofeev V., Fedayay A. Ultra-high-speed electronic devices. Saarbrücken, Germany: LAP LAMBERT Academic Publishing, 2014.
ISBN-13: 978-3-659-52750-0
URL: <https://ee.kpi.ua/~mosk/book/sbpe1.pdf> (дата звернення 16.12.2020)
URL: <https://ee.kpi.ua/~mosk/book/sbpe2.pdf> (дата звернення 16.12.2020)
- [42] Чаплыгин А., Нанотехнологии в электронике / Под. ред., М.: Техносфера, 2005, с. 488.
- [43] Vurgaftman I., Meyer J. Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys. *J. Appl. Phys.*, v. 89, № 11, p. 5815–5862, 2001.
DOI: 10.1063/1.1368156
- [44] Jeffrey G., Parry G., Mozzi R. Study of the Wurtzite-Type Binary Compounds. I. Structures of Aluminum Nitride and Beryllium Oxide. *J. Chem. Phys.* 25(5), 1956. p. 1024,
DOI: 10.1063/1.1743091
- [45] Физикотехнический институт им А Ф Иоффе РАН. New Semiconductor Materials. Biology systems. Characteristics and Properties [Электронный ресурс].
URL: <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM> (дата звернення 16.12.2020)
- [46] Moskaliuk V., Ovcharuk M., Uvarova I. Peculiarities of Electron Heating in Many-valley Semiconductor. Proceedings of the XXXII International Scientific conf. “Electronics and Nanotechnology”, Kyiv, 2012. p. 96-97
URL: http://elnano.kpi.ua/el_baza/ELNANO_2012.pdf (дата звернення 16.12.2020)
- [47] Давыдов С. Ю., Оценки параметров нитридов элементов третьей группы: BN, AlN, GaN и InN. М.: Физика и техника полупроводников, 2002. т. 36, № 1, с. 45–47.
URL: <http://journals.ioffe.ru/articles/viewPDF/39771> (дата звернення 16.12.2020)
- [48] Chen S., Wanga G. High-field properties of carrier transport in bulk wurtzite GaN: A Monte Carlo perspective. *J. Appl. Phys.*, v. 103, pp. 023703-1-6., 2008.
DOI: 10.1063/1.2828003
- [49] Vurgaftman I., Meyer J. Band parameters for nitrogen-containing semiconductors. *J. Appl. Phys.*, v. 94, № 4, p. 3675–3691, 2003.
DOI: 10.1063/1.1600519
- [50] Foutz B. E., Leary S. O., Shur M., Eastman L. Transient electron transport in wurtzite GaN, InN and AlN. *J. of Appl. Phys.*, т. 85, № 11, pp. 7727-7734, 1999.
DOI: 10.1063/1.370577

- [51] Wu J. When group-III nitrides go infrared: New properties and perspectives. *Journal of Applied Physics*, т. 106, № 1, pp. 011101 - 011101, 2009.
DOI: 10.1063/1.3155798
- [52] Kasap S., Capper P. Springer Handbook of Electronic and Photonic Materials. Springer, Cham, 2017.
DOI: 10.1007/978-3-319-48933-9
ISBN 978-3-319-48931-5
- [53] Иващенко В. М., Митин В. В. Моделирование кинетических явлений в полупроводниках. Метод Монте-Карло, К: Наукова думка, 1990. с. 192.
ISBN: 5-12-001286-8
- [54] Zhe Chuan Feng, III-Nitride Semiconductor Materials, Imperial College Press and distributed by World Scientific Publishing Co., 2006. p. 440
DOI: 10.1142/p437
- [55] Masyukov N. A., Dmitriev A. V. Hot Electrons in $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ and $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$ Binary Solid Solutions. М: *Vestnik Moskovskogo Universiteta*, т. 73, № 3, p. 325–328, 2018.
DOI: 10.3103/S0027134918030116
- [56] Звіт з НДР держреєстрація 0111U000774 (д/б 2428-п) Дослідження новітніх напівпровідникових наноматеріалів і їх сполук для впровадження у технологіях виготовлення низько розмірних електронних приладів, 2012.
URL: https://report.kpi.ua/files/2012_2428-p.pdf (дата звернення 16.12.2020)
- [57] Хокни Р., Иствуд Д. Численное моделирование методом частиц. М.: Мир, 1987, р. 640.
- [58] Deng Y., Shur M.S., Kersting R., Xu J., Ascazubi R., Zhang X.-C., Gaska R., Simin G.S., Khan M. Asif, Ryzhii V. Millimeter wave emission from GaN high electron mobility transistor. *J. of Appl. Phys.*, v. 84, № 1, pp. 70-72, 2004.
DOI: 10.1063/1.1638625
- [59] Blotekjaer K. Transport equations for two-valley semiconductors. *IEEE Trans. Electron Devices*, т. ED_17(1), pp. 38-47, 1970.
DOI: 10.1109/T-ED.1970.16921
- [60] Зеегер К. Физика полупроводников: Пер. с англ. Р. Брезиса, А. Матулениса, А. Тетерова, М.: Мир, 1977. с. 616.
- [61] O’Leary S.K., Siddiqua P., Hadi W.A., Foutz B.E., Shur M.S., Eastman L.F. Electron Transport Within III-V Nitride Semiconductors. *Springer Handbook of Electronic and Photonic Materials*, pp. 829-852, 2017.
DOI: 10.1007/978-3-319-48933-9_32
- [62] Прохоров Э. Д., Белецкий Н. И. Полупроводниковые материалы для приборов с междолинным переносом электронов. Харьков: Высшая школа, 1982, р. 144.

- [63] Бокула О., Прохоров Э. Д. Частотные свойства междолинного перехода в нитриде галлия. *К.: Микроэлектронные приборы и устройства*, т. 1, № 1, pp. 24-28, 2011.
- [64] Боцула О. В. Частотные свойства междолинного переноса электронов в AlN. Харьков: *Вісник Харківського національного університету імені В.Н. Каразіна, Серія Радіофізика та електроніка*, т. 927, № 16, с. 7-10, 2010.
URL: <http://ekhnuir.univer.kharkov.ua/bitstream/123456789/7172/2/927-4.pdf> (дата звернення 16.12.2020)
- [65] Боцула О. В. Частотные свойства междолинного переноса электронов в InN. Харьков: *Вісник Харківського національного університету імені В.Н. Каразіна, Серія Радіофізика та електроніка*, т. 942, № 17, с. 67-70, 2010.
URL: <http://dspace.univer.kharkov.ua/bitstream/123456789/7206/2/942-10.pdf> (дата звернення 16.12.2020)
- [66] Shur M. S. GaAs devices and circuits, New York, NY: Springer Science & Business Media, 1987. p. 670
DOI: 10.1007/978-1-4899-1989-2
- [67] Кэррол Д. СВЧ генераторы на горячих электронах, М.: Мир, 1972. с. 384
- [68] Gunn J. Microwave oscillations of current in III–V semiconductors. *Solid State Communications*, V. 1, Issue 4, 1963. pp 88-91
DOI: 10.1016/0038-1098(63)90041-3
- [69] Москалюк В., Синекон Ю., Кассинг Р. Физика электронных процессов. Часть I. Электронные состояния: Учебное пособие, Киев: УкрИНТЭИ, 2001, с. 148.
URL: https://ee.kpi.ua/~yv/edu/ep/book/fep_1.pdf (дата звернення 16.12.2020)
- [70] Москалюк В. О. Фізика електронних процесів. Динамічні процеси., навч. посібник з грифом МОН України, Київ: Політехніка, 2004, р. 180.
- [71] Canali C., Jacoboni C., Nava F., Ottaviani G., Alberigi-Quaranta A. Electron drift velocity in silicon. *Phys. Rev. B*, v. 12, № 6, pp. 2265-2284, 1975.
DOI: 10.1103/PhysRevB.12.2265
- [72] Norton P., Braggins T., Levinstein H. Impurity and Lattice Scattering Parameters as Determined from Hall and Mobility Analysis in n-Type Silicon. *Phys. Rev. B*, v. 8, № 12, pp. 5632-5653, 1973.
DOI: 10.1103/PhysRevB.8.5632
- [73] Morin F. J., Maita J. P. Electrical Properties of Silicon Containing Arsenic and Boron. *Phys. Rev.*, v. 96, № 1, pp. 28-35, 1954.
DOI: 10.1103/PhysRev.96.28

- [74] Bol K., Moskaliuk V. Ballistic Transport in Treenitrids. Proc. IEEE XXXIV International Scientific Conference Electronics and Nanotechnology 2014. Kyiv, Ukraine, 2014, pp. 168-170.
DOI: 10.1109/ELNANO.2014.6873937
- [75] Данилин В., Жукова Т. Транзисторы на GaN пока самый крепкий орешек. М.: *Электроника: наука, технологии, бизнес*, т. 26, № 4, с. 20–28, 2005.
- [76] Конуэлл Э., Кинетические свойства полупроводников в сильных электрических полях: Пер. с англ., М.: Мир, 1970, с. 384.
- [77] Stillman G. E., Waife C. M., Dimmock J. O. Hall coefficient factor for polar mode scattering in n-type GaAs. *J. Phys. Chem. Solids*, v. 31, № 6, pp. 1199-1204, 1970.
DOI: 10.1016/0022-3697(70)90122-8
- [78] Blakemore J. S. Semiconducting and other major properties of gallium arsenide. *J. Appl. Phys.*, v. 53, № 10, pp. R123-R181, 1982.
DOI: 10.1063/1.331665